

Алгоритмический подход к квантовой физике

Ю.И.Ожигов*

Московский Государственный Университет,
Физико-технологический институт РАН

26 декабря 2004 г.

Аннотация

Алгоритмический подход основан на предположении о том, что любую эволюцию многочастичной квантовой системы можно моделировать на классическом компьютере с не более чем полиномиальными затратами времени и памяти. Центральную роль при этом играют алгоритмы, а не аналитический аппарат, а главным результатом моделирования являются "фильмы", демонстрируемые пользователю модели и визуализирующие квантовую многочастичную динамику. Ограничения, вытекающие из теории алгоритмов, рассматриваются наравне с фундаментальными законами физики. Борновское правило вычисления вероятностей, так же как и декогерентность, выводится из существования минимального ненулевого значения модуля амплитуды - зерна амплитуды. Ограниченность классических вычислительных ресурсов дает единое описание квантовой динамики, которое не делится на унитарную и измерения, и не зависит от присутствия наблюдателя. Дается описание состояний, основанное на вложенности частиц друг в друга, что позволяет учесть в одной модели эффекты всех уровней. Алгоритмический подход допускает возможность опровержения, так как он исключает построение масштабируемого квантового компьютера, который разрешен в стандартном формализме.

1 Введение

Понятие классического алгоритма и вычислительные машины стремительно проникают во все области естествознания. Это проникновение дает новый язык для описания науки, основанный в большей мере на алгоритмах, чем на формулах и принципах, которые были характерны для традиционных подходов. Этот новый подход несет в себе довольно серьезное изменение содержания наук, которое не осознается пока в полной мере только в силу невероятной гибкости и всеобщности алгоритмического описания природы. Однако мы уже сталкиваемся с удивительными особенностями этого нового языка, которые принципиально отличают его от языка традиционного, и которые в принципе могут быть установлены в экспериментах. Это связано с наиболее продвинутой частью естествознания - с физикой, а точнее, с квантовой физикой, где такое различие проявилось очень явно; о нем и пойдет речь в этой работе¹.

*e-mail: ozhigov@cs.msu.su

¹К идее такого подхода независимо пришел ряд исследователей; упомяну здесь В.Акулина, который высказывал ее в беседе с автором; отдельные предложения возможных ограничений действия формализма многочастичных гильбертовых пространств постоянно высказываются и целым рядом других ученых, в особенности, занимающихся проблемой декогерентности (см. например, ([Fe],[Ak]).

Алгоритмический подход в физике основан на одной очень простой идее: компьютер должен рассматриваться как важнейший физический прибор, обязательно присутствующий во всех экспериментах. На самом деле все обстоит именно так; даже когда компьютеров не существовало, их роль выполнялась самими физиками, которые производили вычисления вручную. Из такого допущения следует, что мы должны рассматривать все ограничения, которым подчиняется компьютер, наравне с физическими законами. Эти ограничения вытекают из теории алгоритмов, и их можно условно назвать вычислительными ограничениями. Главное предположение алгоритмического подхода было не очень содержательным до тех пор, пока вычислительные ограничения можно было игнорировать, то есть до тех пор, пока традиционные физические задачи можно было с успехом решать, либо вообще игнорируя компьютер, либо сводя его роль к роли арифмометра для вычислений по заданным формулам². Ситуация изменилась тогда, когда традиционный аналитический формализм физики вступил в конфликт с ее новыми задачами. Это стало особенно очевидно после начала разработки гипотетического квантового компьютера, который и был призван этот конфликт разрешить. Концепция квантового компьютера исходит из приоритета аналитического аппарата перед алгоритмами. То есть здесь по умолчанию принимается, что понятие классического алгоритма не является фундаментальным и может быть с легкостью заменено на вычислительную процедуру иного типа - квантовое вычисление. Это предположение является попыткой экстраполяции квантовой механики на область, в которой она никогда раньше не проверялась, и потому квантовый компьютер надо рассматривать как интересную гипотезу, к обсуждению которой мы еще вернемся.

А пока попробуем понять, что мы получим при алгоритмическом подходе: когда мы примем концепцию алгоритма как наиболее фундаментальную. Одна из главных особенностей этого подхода - возможность создания полной модели наблюдаемых событий с помощью классического компьютера, который использует эффективные алгоритмы и который не зависит от экспериментатора. Под эффективным алгоритмом понимается алгоритм, использующий для работы ресурсы (время и память), ограниченные некоторым полиномом от размера памяти, необходимого для описания состояния моделируемой системы³. Такая модель должна в каждый момент времени показывать распределение вероятности обнаружения любой подсистемы рассматриваемой системы в любом состоянии, для которого эта вероятность p достаточно велика. Например, можно считать, что $pT_{tot} > 1$, где T_{tot} - наибольшее доступное нам значение времени.

Работу такого моделирующего алгоритма можно представлять себе в виде "фильма", который демонстрируется пользователю, и в который пользователь не может вмешаться; у него есть только возможность "заказать" такой фильм заранее, указав, например, какие измерения и в какой момент он намерен сделать над моделируемой системой⁴. Иными словами, мы смотрим на природу, как

²Строго говоря, игнорировать вычислительные ограничения нельзя никогда. Например, математически точное рассмотрение даже движения одного электрона в вакууме с учетом релятивистских эффектов (превращений фотонов и электрон-позитронных пар) приводит к суммированию расходящихся рядов и всевозможным трюкам, для которых математическое обоснование их законности держится на неявном признании приоритета алгоритмов, а не описательного аппарата вроде частиц и их взаимодействий. Именно этот приоритет используется для метода перенормировок, когда классический подход к описанию пространства-времени при превращениях частиц приносится в жертву ради сохранения удобства алгоритмического описания динамики. Квантовый метод победил в атомной физике именно благодаря тому, что он давал эффективные алгоритмы, приводящие к правдивым предсказаниям, в отличие от классического, который таких алгоритмов не предлагал. Например, уравнение Шредингера дает спектр атома водорода после сравнительно несложных вычислений, в то время как классическое рассмотрение этого не дает, а вычисление по классической схеме для движения одного электрона в поле ядра с учетом электромагнитного поля и уравнений Максвелла и релятивистского выражения для энергии вообще до сих пор не проведено до конца по той причине, что такая постановка не дает эффективных вычислительных процедур.

³Класс алгоритмов полиномиальной сложности не зависит от способа формализации алгоритма.

⁴Разумеется, если предоставить пользователю право вмешиваться в "фильм", проводя измерения, задача станет неразрешимой в силу квантовой нелокальности. Но практической ценностью обладает именно наша постановка задачи, так как она способна дать ответ на главный вопрос экспериментатора: что получится в случае таких-то и таких-то действий над заданной системой. При этом задержка по времени, компенсирующая недостаточное быстрействие, тоже должна быть обозримой и не может превышать так же как и выше установленных пределов. При практическом моделировании используемые вычислительные ресурсы вообще должны расти линейно с ростом числа частиц в

на "фильм", который показывается нам с помощью моделирующего компьютера, включенного в некую классическую вычислительную сеть, причем мы, как пользователи, лишены прав доступа внутрь этой сети. Такую сеть можно представлять себе как модель связанной с данным пользователем системы отсчета. Вся информация, с которой работает моделирующий компьютер, имеет таким образом вид двоичных цепочек ограниченной длины. Физические величины, необходимые для правильного показа "фильма" (например, энергия связей в молекуле, среднее расстояние между атомами и т.д. вычисляется моделирующим компьютером в ходе подготовки "фильма", и используются в ходе этой демонстрации. Такого рода "фильмы" являются самым общим видом описания физических явлений, который и соответствует алгоритмическому подходу. Речь, таким образом, идет о замене традиционного для физики математического аппарата (анализ и алгебра) другим математическим аппаратом (алгоритмы), обладающим большей общностью, но который, в силу исторических причин, менее известен физикам. Мы не будем здесь развивать эту мысль, сосредоточившись на практических аспектах такого подхода. Заметим только, что это описание имеет то преимущество, что с ним можно работать специалистам всех областей естествознания; такая возможность может оказаться принципиально важной для самой судьбы этого подхода.

Принципиальным следствием алгоритмического подхода является существование минимального и ненулевого значения модуля амплитуды, так называемого кванта (или зерна) амплитуды. Тезис о кванте амплитуды дает классическую урновую схему для квантовой вероятности, из которой следует правило Борна для вычисления квантовой вероятности (см. ниже). Более того, представление о кванте амплитуды позволяет дать единое описание квантовой эволюции, которое не делится на унитарную эволюцию и измерения и не зависит от присутствия наблюдателя. Это делает "фильмовое" представление динамики таким же объективным, как и широко используемое "формульное" представление.

Прежде чем перейти к детальному описанию алгоритмического подхода нам необходимо кратко напомнить о его истоках. Этот подход возникает из попыток создать компьютерную модель эволюции многочастичной системы с квантовым поведением (например, химических реакций). Это включает динамику атомных и молекулярных структур, связанную с изменением состояния системы электронов, ответственных за образование химических связей между атомами. Как хорошо известно, поведение электрона в принципе невозможно описать на основе классической динамики, скажем, представляя его как шарик, движущийся в кулоновском поле ядра. Тем более это невозможно для системы из нескольких электронов. Уже при описании электронных конфигураций атомов и молекул возникает принципиальная трудность, связанная с тем, что размерность пространства состояний многоэлектронной системы растет экспоненциально с ростом числа электронов даже если мы ограничим число возбужденных уровней линейной функцией от этого числа. Такие состояния обычно представляются в виде детерминантов Фока-Слэтера, составленных из одноэлектронных волновых функций, которые подбираются из условия равенства нулю вариации энергии многочастичного состояния (см. ([Sl])). При вычислении таких детерминантов нам придется совершать экспоненциальную работу в зависимости от их размера, кроме того, их число тоже будет расти экспоненциально. Поэтому существующие алгоритмы для молекулярного моделирования принимают в расчет только заранее ограниченное число электронов (например, только два электрона на каждую валентную связь, причем для этой пары расчет состояния ведется тоже ведется не в полном пространстве состояний а в приближении среднего поля или подобном ему). Квантовые же состояния ядер атомов вообще не принимаются в расчет, то есть считают, что ядра представляют собой классические шарики на пружинках, где пружинки определяются стандартно рассчитываемыми конфигурациями электронных систем и кулоновским взаимодействием ядер. В такую модель затем приходится вручную вносить последовательные дополнения, связанные с квантовым характером движений ядер. Например, давно известное и важное в биохимии явление туннелирования прото-

моделируемой системе, в противном случае у нас не будет надежды построить хоть сколько-нибудь содержательный "фильм".

на требует описания его динамики в виде волновой функции а не классическим путем; к этому же классу явлений относится туннелирование атома азота в молекуле аммиака, ответственное за наблюдаемый спектр этой молекулы, водородные связи и т.п. Этот более сложный класс явлений не может быть описан в рамках модели "шариков на пружинках", но эту простую модель еще в принципе можно модифицировать для учета независимого туннелирования отдельных ядер. Однако существуют более сложные явления, связанные с квантовой запутанностью электронов и ядер. Простейший пример такого явления - дифракция молекулы при проходе через щель. Здесь вся молекула ведет себя как одна квантовая частица. Такое явление в принципе невозможно моделировать методом среднего поля или "шариков на пружинках" (см. ниже). Подобный класс явлений называют еще "коллективными возбуждениями". Имеющиеся попытки построить модель таких явлений всегда связаны с очень серьезным ограничением возможных движений частиц в рассматриваемой системе (например, в работе ([NF]) предполагается, что частицы представляют собой отдельные "волновые пакеты", имеющие гауссову форму); они таким образом не дают универсального пути моделирования многочастичных квантовых систем.

Еще один тип эффектов, которые не учитываются в моделях классического типа связан с учетом электродинамики. Пренебрежение учетом эффекта запаздывания действия электрического поля при движении заряженной частицы при ее малых скоростях вполне оправдано при вычислении атомных спектров. Например, лэмбовская поправка к уровням энергии атомов не превосходит 10^{-3} от расстояния между соседними уровнями. Однако пренебрежение эффектом излучения и поглощения фотонов при рассмотрении химических реакций уже часто бывает недопустимо. Есть важные классы реакций, в которых этот процесс вообще играет основную роль, как например, фотосинтез; известны также методы управления химическими реакциями с помощью лазерных импульсов (см. ([SB], [GTK])).

Необходимость учета квантовой природы элементарных частиц при изучении молекулярных превращений была осознана давно, однако сделать это на практике трудно из-за принципиального различия в формах классического и квантового описания динамики. В классической динамике многих тел трудность возникает из-за неустойчивости траекторий, ведущей к хаотическому поведению системы⁵. Эта трудность исчезает, если мы предположим, что множество значений координат и скорости (в классическом случае это просто пространство одночастичных состояний) зернисто, как это всегда делается при компьютерном моделировании. В квантовом случае этот прием не помогает, так как основная трудность состоит в другом. Здесь пространство одночастичных состояний не совпадает с множеством значений для координат (или скоростей), а является линейной комбинацией всевозможных таких значений. Свести состояние к одному значению координаты и скорости невозможно в силу принципа неопределенности: чем точнее мы определим значение координаты, тем больший получим разброс по скоростям и наоборот, в то время как для динамического описания надо знать как координату так и скорость частицы (в квантовом случае - распределение по всем координатам или по всем скоростям, то есть всю волновую функцию). Необходимость использовать линейные комбинации всевозможных значений динамических переменных является принципиальной, и сохраняется даже если мы будем считать множество значений для этих переменных зернистыми. Это с необходимостью ведет к экспоненциальному росту размерности пространств многочастичных квантовых состояний - что и составляет чисто квантовую трудность, которая отсутствует в теории классических многочастичных задач. Именно из-за этой трудности применение, скажем, методов статистической квантовой физики не позволяют построить модель эволюции многочастичных квантовых систем.

Задача моделирования эволюции многочастичной квантовой системы имеет ряд особенностей, отличающих ее от традиционных задач теоретической физики и выявляющих слабость традиционного аналитического формализма квантовой теории. Здесь необходима целостная картина про-

⁵Решается это применением всевозможных приемов, основанных на теории вероятностей, например, термодинамики.

исходящего, что включает не только унитарную квантовую эволюцию, но и последовательные измерения, о которых нам следует предполагать, что они не зависят от наличия наблюдателя, что вряд ли совместимо с традиционным квантовым формализмом. Таким образом, моделирование, основанное на аналитическом формализме, требует постоянного перехода от квантового описания к классическому и наоборот. О второй трудности уже было сказано; она состоит в том, что согласно многочастичному квантовому формализму размерность пространства состояний системы, состоящей из двух частей, равна произведению размерностей соответствующих пространств состояний; и таким образом, эта размерность будет расти экспоненциально с ростом числа частиц в рассматриваемой системе. Эта вторая трудность является очень серьезной, и она превращает задачу алгоритмизации физики в фундаментальную научную проблему, так как возникает вопрос о том, каким образом устроен мир: допускает он эффективное алгоритмическое описание, или нет. Конечно, вопрос о наличии такого описания в философском плане стоял уже давно - со времен формализации понятия алгоритма. Но только после открытия квантового компьютеринга этот вопрос превратился в совершенно определенную физическую проблему, предполагающую однозначное решение. Дело в том, что если в природе реализуются пространства квантовых состояний экспоненциально растущей размерности, то принципиально возможным будет существование так называемого неограниченно-го (масштабируемого) квантового компьютера. Такое устройство может решать некоторые очень важные вычислительные задачи почти с экспоненциальным ускорением по сравнению с лучшими из известных классических алгоритмов. К числу таких задач относятся, например, факторизация целых чисел или переборная задача. Очень важно также и то, что квантовый компьютер способен решать многочастичное уравнение Шредингера за время, растущее как квадрат реального физического времени для моделируемой системы при затратах памяти порядка числа ее частиц - иными словами, он способен моделировать квантовую механику многих тел без всяких упрощений!⁶ Понятно, что практическое построение масштабируемого квантового компьютера означало бы крах алгоритмического подхода, ибо никакой эффективный алгоритм не смог бы моделировать его работу. Действительно, если бы это можно было сделать, то мы бы получили классический алгоритм, решающий, скажем, задачу перебора быстрее, чем за время прямого перебора вариантов, что невозможно⁷. Я не буду здесь разбирать состояние экспериментальных работ в области квантового компьютера, которые пока не увенчались успехом (представление о них можно составить по общему электронному архиву <http://xxx.lanl.gov>). Развитие технологий квантового компьютера - абсолютно необходимое направление в физике, логически вытекающее из общепринятого математического аппарата. Логическая цепочка: "алгебраическая техника - волновая многочастичная функция - квантовый компьютер" является совершенно фундаментальной. Более детальные исследования существующих подходов к созданию квантового компьютера, таких как твердотельные квантовые точки, ионные ловушки и джозефсоновские переходы (см. ([VK])) подтверждают естественный вывод: никаких запретов на создание масштабируемого квантового компьютера в известной части физики не существует. Однако продвижение в экспериментальной области идет слишком медленно для того, чтобы считать такую перспективу единственно возможной. Именно отсутствие ясных продвижений в экспериментальной области является главной причиной роста интереса к альтернативному - алгоритмическому подходу, который мы и собираемся рассмотреть.

Два момента вызывают подозрения в том, что запрет на существование масштабируемого квантового компьютера может существовать в природе несмотря на то, что его нет в квантовой физике.

⁶Идея квантового компьютера и была выдвинута Фейнманом, а также Беньюфом и др. с целью дать принципиальный путь для моделирования многочастичных задач. Эта догадка превратилась в строгий результат в работах Залки ([Za]) и Визнера ([Wi]).

⁷Строго говоря, это не является доказанной математической теоремой, а следует из того, что можно назвать математической "практикой", то есть метаматематическим утверждением, которому можно придать строгую форму, лишь огрубляя его (отдаленно похожий пример - тезис Черча). Однако результаты такой "практики" обычно принимаются в физике без всяких возражений. Причина этого в том, что такое огрубление не выходит за рамки обычной абстракции, применяемой при переходе от явлений природы к математическому формализму. Алгоритмический подход как раз и есть такой переход от одного формализма (анализ) к другому (алгоритмы).

Первый момент связан с проблемой декогерентности, которая трактуется как влияние окружающей среды на квантовую систему, и приводящей к необратимой порче состояния этой системы. Именно на декогерентность и возлагается ответственность за неудачи экспериментальных попыток построить масштабируемый квантовый компьютер. Схематично декогерентность в стандартном квантовом формализме можно представить так. Пусть первый кубит $|\psi\rangle_{sys}$ обозначает состояние изучаемой системы⁸, $|\phi\rangle_{env}$ - состояние ее ближайшего окружения. Если первоначально мы приготовили систему в состоянии $|\psi\rangle_{sys} = \alpha|0\rangle_{sys} + \beta|1\rangle_{sys}$, а ближайшее окружение находилось в индифферентном состоянии $|0\rangle_{env}$, то разумно предположить, что после контакта расширенная система: система + ближайшее окружение будет находиться в состоянии, которое получается из состояния до контакта $|\Psi_{ini}\rangle = (\alpha|0\rangle_{sys} + \beta|1\rangle_{sys}) \otimes |0\rangle_{env}$ применением какого-либо запутывающего оператора, например, CNOT, то есть результирующим будет запутанное состояние $|\Psi_{fin}\rangle = (\alpha|0\rangle_{sys} \otimes |0\rangle_{env} + \beta|1\rangle_{sys} \otimes |1\rangle_{env})$. Теперь если ближайшее окружение так же провзаимодействует со своим ближайшим окружением, то в свою очередь со своим и т.д., мы в результате получим состояние типа $\alpha|00\dots 0\rangle + \beta|11\dots 1\rangle$ (знак тензорного произведения опущен), в котором еще и происходит рост размерности из-за постоянного наращивания длины этой цепочки рядом расположенных окружений, обозначенных многоточием. В такой ситуации в рамках стандартного квантового формализма предполагается, что наблюдение одного из окружений приведет к коллапсу волновой функции, и исходная система окажется либо в состоянии $|0\rangle_{sys}$, либо в состоянии $|1\rangle_{sys}$, что и будет означать декогерентность. Мы видим существенный дефект такого описания, происходящий из-за необходимости привлекать наблюдателя, что недопустимо при моделировании динамики, поскольку это ведет к зависимости модели от постоянно действующего артефакта, ибо наблюдатель не может быть описан в рамках данного формализма даже при наличии квантового компьютера. Это неустранимая особенность традиционного гильбертова многочастичного формализма, которую при исследовании декогерентности просто игнорируют, заменяя ссылкой на классический характер прибора, производящего измерения над квантовыми объектами ([Fe]).

Второй момент состоит в том, что экспоненциальная размерность гильбертовых пространств состояний никогда ранее не проверялась экспериментально. Все в настоящее время известные факты, проверенные на экспериментах и объясненные теоретически могут быть выведены из теории с помощью эффективных классических алгоритмов. Это означает, что вся реальная физика находится в рамках таких алгоритмов, и нет никаких свидетельств против того, что алгоритмический подход является универсальной формой физики. Практические методы вычислений, которые редуцируют теоретические схемы до эффективных алгоритмов, могут быть сложны, но их эвристика обычно проста. Например, при вычислении волновых функций стационарных состояний электронов в сложных атомах вместо решения многочастичного уравнения Шредингера рассматривают поведение одного электрона в поле, которое создается ядром и другими электронами с учетом их распределенности в пространстве (метод среднего поля). При этом такой прием дает неплохое согласие с опытами, скажем позволяет удовлетворительно находить энергию ионизации, спектр и пространственную конфигурацию молекул. Все более точные вычисления, включая, например, релятивистские поправки, также можно вычислить с помощью эффективных классических алгоритмов.

Однако квантовый формализм гильбертовых пространств говорит нам, что ничтожно малые амплитуды λ , (которые не могут быть непосредственно обнаружены ни в каких экспериментах, поскольку время ожидания $1/|\lambda|^2$ слишком велико), могут, интерферируя в огромных количествах, сложиться в реально наблюдаемые величины. Причем эта интерференция может быть организована за вполне приемлемое время. В этом и состоит суть квантового компьютеринга. Существуют ли такие эффекты в реальности, мы не знаем. Во всяком случае все те явления, которые имеют теоретико-физическое обоснование, не требуют для этого обоснования привлечения экспоненциально малых

⁸ Кубит взят здесь только для простоты. Его можно заменить на волновой вектор в пространстве состояний произвольной размерности.

амплитуд.

Таким образом, алгоритмическое описание физики может оказаться в принципе возможным. Если мы примем, что успех различных приближенных методов типа Хартри-Фока в молекулярных расчетах не случаен, то может оказаться возможным построить эффективный алгоритм моделирования эволюций для систем из многих частиц. Алгоритмическое описание квантовой физики радикально отличается от стандартного тем, что в его основе лежит понятие классического алгоритма, а не анализ бесконечно малых, как в стандартном формализме⁹. Я позволю себе назвать описываемый подход алгоритмической физикой; это название не подразумевает никаких аналогий, а только указывает на принципиальное отличие этого подхода от общепринятого в физике. В общей форме его можно рассматривать как гипотезу, альтернативную гипотезе масштабируемого квантового компьютера. Единственная возможность опровергнуть ее - это построить масштабируемый квантовый компьютер; не видно никакой другой возможности опровергнуть алгоритмическую физику, несмотря на то, что она очень отличается от обычной.

2 Основные черты алгоритмической физики

2.1 Общие замечания

Зачем вообще нужны алгоритмы в физике, и почему для ее дальнейшего развития не достаточно стандартного математического аппарата: анализа и алгебры? Строго говоря, для физики как таковой алгоритмы нужны только как вспомогательное средство, которое предназначено для решения уравнений, выражающих физические законы. Алгоритмы и вычислительные машины традиционно применяются в физике вынужденно, и их использование связано только с тем хорошо известным обстоятельством, что системы уравнений динамики систем многих тел в общем случае не имеют аналитического решения. Иначе говоря, если мы и можем сформулировать законы в виде формул, то извлечь из этих законов практически важные следствия, то есть траектории движения тел, пользуясь только формулами, невозможно. Именно эту брешь в традиционном математическом аппарате и стали заполнять алгоритмы. При алгоритмическом подходе в классической физике производные заменяются на разностные схемы, после чего задача решения системы дифференциальных уравнений сводится к задаче линейной алгебры. Главным недостатком такой общей схемы является неустойчивость решений динамических систем. Малые изменения начальных условий приводят к огромным расхождениям через ограниченный промежуток времени, что делает применение метода конечных разностей в ряде случаев малоэффективным. Однако эта трудность не кажется фатальной. Законы классической динамики нельзя применять при расстояниях меньших 10^{-8} см, поскольку в этой области для описания объектов надо пользоваться понятиями квантовой механики. При квантовом механическом же описании состояние частицы представляет собой волновую функцию, распределенную по всей области классических положений частицы, и тогда малое изменение начальных условий может привести только к столь же малым изменениям конечного состояния независимо от времени эволюции (ситуация изменится, если мы допустим измерения). По крайней мере,

⁹ Математический анализ традиционно является тем добротным базисом, на котором воспитывается физическая интуиция. Надо, однако, ясно понимать, что у всего есть пределы. Так и стандартный анализ пригоден как формальный аппарат физики до тех пор, пока он не приводит к какому-то явному выходу за пределы алгоритмов. Существует урезанная версия математического анализа, в которой рассматриваются только вычисляемые функции - так называемый конструктивный математический анализ. Он сильно отличается от стандартного; например, в нем все функции являются непрерывными. Такой подход во многом больше соответствует физике, чем стандартный. Например, использование квантов амплитуды, описываемое в Приложении 1, приводит к описанию квантовых состояний именно в терминах конструктивного анализа. Но метод квантов амплитуд является частным методом, так что алгоритмический подход, описываемый нами, ни в коем случае нельзя приравнять к замене стандартного анализа на конструктивный. Использование разрывных функций в ряде случаев очень удобно для построения алгоритмов. Вообще в алгоритмическом подходе допускается использование любых описательных приемов, важно только, чтобы они не выходили за пределы эффективных вычислительных процедур.

в квантовой механике нет того препятствия для применения алгоритмического подхода, который присутствует в классической физике.

Принятие алгоритмического подхода никак не может повлиять на достигнутое к настоящему времени в физике, так как все факты в ней получаются из основных законов и некоторого набора естественных и простых исходных посылок с помощью эффективных алгоритмов. Явное отличие от традиционного понимания физики при таком подходе связано с возможностью построения масштабируемого квантового компьютера, который разрешен в традиционной физике и запрещен в алгоритмической физике; однако такое устройство лежит пока еще довольно далеко от обычных экспериментов, и может представляться чем-то вроде абстракции. Кроме того, можно сказать, что даже если неограниченный квантовый компьютер и возможен, его практическое создание слишком далеко от наших возможностей в обозримом будущем, и такой аргумент в пользу примирения с традиционным взглядом на физику будет вполне законным. Поэтому может показаться, что алгоритмический подход есть просто практический взгляд на физику специалистов по программированию, участвующих в моделировании физических задач, от которого не следует ждать ничего, кроме усовершенствования численных методов расчета. Однако это мнение ошибочно. Алгоритмический подход радикально отличается от традиционного, так как он дает некоторое новое понимание стоящих перед физикой задач и ее взаимоотношений с приложениями, а также новую трактовку такого принципиального явления, как декогерентность. Ограниченность классических вычислительных ресурсов моделирования диктует необходимость "урезанного" описания унитарной эволюции по сравнению с гильбертологией¹⁰. Такое описание обязательно должно фактически содержать мягкие измерения текущего состояния, поскольку для описания унитарной многочастичной эволюции у нас не хватает классических вычислительных ресурсов. Мы, таким образом, не должны следить за декогерентностью специально, потому что она возникнет в модели независимо от нашего желания, просто как мера отклонения классического описания от многочастичного гильбертова формализма.

Самый естественный способ такого "урезания" гильбертова формализма состоит в следующем. Мы просто не учитываем тот вклад в волновую функцию, которую дают состояния со слишком малой по модулю амплитудой. А именно, пусть T - размер доступного вычислительного ресурса (либо число шагов алгоритма, либо число элементов его памяти). Тогда мы будем считать равными нулю все амплитуды λ , такие что $|\lambda| < \frac{1}{\sqrt{T}}$. Это означает, что мы будем считать невозможным то событие, квантовая вероятность которого слишком мала, для того чтобы сделать его наблюдаемым за доступное время ожидания T . У нас, конечно, нет никакого априорного метода определения того значения T , которое существует в действительности. Но выбирая T , исходя из возможностей имеющейся вычислительной техники, мы сможем моделировать многочастичные эволюции с максимальной возможной учетом всех квантовых эффектов. Мы таким образом, принимаем, что амплитуда является не непрерывной, а зернистой величиной, где ее зерно ϵ - минимальное ненулевое значение, настолько мало, что его непосредственное измерение невозможно из-за огромности времени ожидания $1/\epsilon^2$ столь редких событий. Однако в том случае, если значение ϵ не является экспоненциально малым, это должно проявляться в многочастичных квантовых задачах, в частности, делая невозможным создание масштабированного квантового компьютера.

Ниже мы увидим, что это простое правило урезания очень просто дает две важнейшие вещи: объяснение борновского правила вычисления квантовой вероятности как квадрата модуля амплитуды, и единое описание квантовой динамики, включающего как унитарную эволюцию, так и декогерентность. Более того, это правило позволяет получить классическое описание динамики из квантового без применения каких-либо искусственных приемов. Желательность такого целостного описания динамики подчеркивалась с самого основания квантовой физики¹¹. Мы приведем ряд доводов в пользу того, что такое описание может быть получено именно в терминах алгоритмической

¹⁰ Термин принадлежит С.Н.Молоткову.

¹¹ См., например, полемику Эйнштейна с Бором. В более поздних работах эта неудовлетворенность странной ситуацией с квантовой физикой приводило к попыткам найти ее связь с феноменом сознания (см. например [Pe], [Ha]).

физики.

Мы видим, что принятие эффективного классического алгоритма в качестве базисного понятия физики, взамен аналитического и алгебраического аппарата влечет за собой далеко идущие последствия. Компьютерные методы расчета, дающие хорошее согласие с экспериментом и которые трактуются обычно как приближение к реальности, должны будут восприниматься как ее первопринципное описание, при котором неточность рассматривается как результат несовершенства применяемых алгоритмов или плохие исходные данные. Аналитический же аппарат современной квантовой физики рассматривается всего лишь как инструкции по составлению моделирующих алгоритмов и инструмент их отладки. Ограничения, имеющие чисто алгоритмическую природу, при данном подходе придется принимать наравне с фундаментальными законами физики. Это, в частности, ведет к тому, что необратимость изменения квантового состояния при наблюдении или декогерентности должна рассматриваться не как результат действия наблюдателя, а как результат нехватки классических вычислительных ресурсов для описания текущего состояния системы. Такая трактовка декогерентности совершенно не приемлема с точки зрения обычного подхода, однако она не ведет ни к каким явным противоречиям. Это устраняет наблюдателя из описания квантовой динамики, и придает алгоритмическому формализму ту завершенность, которая отсутствует в стандартной квантовой механике.

Следующей особенностью алгоритмического подхода является разделение модели на две части: пользовательскую и административную, которое связано с применимостью принципа "свободной воли". К пользовательской части принадлежит та часть информации о моделируемой системе, к которой этот принцип применим, а к административной - вся прочая информация, которая необходима моделирующему компьютеру для правильного показа "фильма". Например, координаты всех точек в рассматриваемой области пространства-времени надо относить к пользовательской части, поскольку у пользователя есть свободный доступ к этой области. Траекторию любой частицы, лежащую внутри светового конуса, надо также относить к пользовательской части, так как такую траекторию можно реализовать при желании пользователя. Вообще любой процесс, который описывается в терминах так называемого локального реализма (то есть без присущего квантовым явлениям дальнего действия) надо относить к пользовательской части модели. Проще всего необходимость административной части можно объяснить на примере моделирования запутанных состояний фотонов: ЭПР пар. Если два детектора для измерения двух фотонов находятся на большом расстоянии друг от друга, то для моделирования эксперимента по порождению и детектированию ЭПР пары нельзя обойтись только пользовательской частью модели. Действительно, предположим, что ориентация одного из детекторов изменилась так быстро, что световой сигнал об этом изменении не успевает добраться до второго детектора за время эксперимента. В силу наличия свободной воли в пользовательской части (к которой принадлежат оба детектора это всегда можно сделать, причем случайным способом). Тогда статистика результатов измерений второго фотона не должна измениться по сравнению с тем случаем, когда первый детектор неподвижен, но статистика совместных измерений обоих детекторов изменится. Если бы в нашем распоряжении была только пользовательская часть модели, мы должны были бы считать, что какой-то объект, несущий информацию, движется по траектории, лежащей вне светового конуса, что невозможно. Таким образом, для правильного описания квантового дальнего действия на классических вычислительных устройствах необходима административная часть модели.

Слабая сторона алгоритмического подхода проистекает из его возможной контекстуальности. Дело в том, что если мы с самого начала ограничиваемся классическими алгоритмами полиномиальной сложности, то для описания квантовых систем мы обязаны каким-то образом ограничить рост размерности гильбертова пространства \mathcal{H} состояний многочастичной системы, что, говоря очень общо, означает выбор некоторого его малого подмножества \mathcal{H}_0 . Например, если речь идет об электронной конфигурации молекулы при заданном положении ядер атомов, выбор \mathcal{H}_0 сводится к выбору одночастичных электронных функций и их групп, из которых затем формируются

детерминанты Слетэра (см. ниже). Однако многочисленные работы по квантовой теории молекул свидетельствуют о том, что единого метода подбора этих одночастичных функций, который бы годился для всех молекул, может и не существовать. Это значит, что выбор базисных волновых функций для одной частицы зависит не только от ее типа, но и от ее окружения, то есть от положения других частиц (в случае электронной конфигурации этим окружением будет положение ядер атомов). Иными словами, свойства частицы, которые мы принимаем во внимание при алгоритмическом подходе (а только о таких свойствах имеет смысл говорить) могут зависеть не только от ее типа, но и от того контекста, в котором эта частица рассматривается. Если мы говорим о моделировании динамики квантовой системы, это означает, что выбор подмножества $\mathcal{H}(t)_0$, зависит от состояния окружения $\mathcal{H}(t_{env})_{env}$ в моменты времени $t_{env} \leq t$, где t в данном случае обозначает не физическое время, а время в административной части моделирующей системе, пропорциональное числу шагов алгоритма¹². Эта связь рассматриваемой квантовой системы с окружением определяется запутанностью и она неустранима при любом подходе к моделированию квантовых явлений. Таким образом, для описания рассматриваемой системы необходимо иметь некоторую априорную модель поведения окружения, или некоторый сценарий, определяющий эволюцию этого окружения. В действительности, мы вынуждены иметь некоторую априорную модель поведения самой моделируемой системы, для того, чтобы оптимальным образом выбрать эволюцию подмножества $\mathcal{H}(t)_0$. Получается, что моделирование в обычном смысле, когда мы задаем независимые от модели начальные условия и получаем в конце ответ, уже будет не всегда возможно. Если мы не знаем заранее, какой вид имеет \mathcal{H}_0 , единственным путем будет рассмотрение полного гильбертового пространства, что немедленно приведет нас к непреодолимому феномену квантового компьютера.

Причина этой трудности состоит в следующем очевидном факте. Вычислительные ресурсы, находящиеся в нашем распоряжении, можно очень грубо оценить числом 10^9 . В обозримом будущем это число может возрасти не более, чем на 3-4 порядка, в основном, за счет распараллеливания вычислений и создания вычислительных сетей. В то же время число атомов при плотной упаковке в 1 кубическом сантиметре очень приблизительно равно 10^{24} . Мы видим, что разрыв между нашими вычислительными мощностями и размерами систем, которые мы в принципе собираемся моделировать, составляет 15 порядков. Если учесть пространственные степени свободы, что необходимо делать при реальном моделировании, даже без учета запутанности, этот разрыв возрастет до примерно 24 порядков. Если даже основное предположение алгоритмического подхода верно, и природа представляет собой, по сути, гигантскую вычислительную сеть, то прямое моделирование этой сети известными вычислительными приемами, которые фактически являются "расчетом по формулам", например, конечно-разностным методом, может быть успешным только тогда, когда при росте атомов в моделируемой системе ее поведение по-существу не меняется (например, для правильных кристаллов). В тех важнейших случаях, когда сложность поведения системы принципиально зависит от ее размеров такие методы ведут к прямому соревнованию нашего компьютера с реальной моделью, и, следовательно, не имеют ни малейших шансов на успех. К таким случаям относятся так называемые квантовые эффекты, прежде всего запутанные состояния частиц.

То, что эти эффекты существуют, доказано в большом числе разнообразных экспериментов, но о том, как они влияют на хорошо известные и наблюдаемые процессы, например, на течение химических реакций, известно очень мало. В действительности почти все то, что можно взять от аналитического и алгебраического аппарата, уже воплощено в те самые прямые вычислительные приемы, о которых мы говорили выше, и даже более того - в существующих программных продуктах. В дальнейшем надежда может возлагаться, в основном, на вычислительные приемы другого типа, которые происходят из так называемых полуэмпирических методов. К их числу относятся, например, генетические алгоритмы. Моделируемую многоатомную структуру можно разбить на малые части, применяя различные методы нахождения электронных состояний в каждой из этих

¹²Его связь с локальным физическим временем зависит от моделируемого пространства, и мы коснемся этой темы в Приложении 2.

частей. По истечении некоторого времени можно сравнить результаты, и выбрать из этих методов небольшое число тех, которые дают наиболее адекватную картину эволюции. Мы затем можем комбинировать такие избранные методы, и заменить ими и их комбинациями все прочие методы, после чего повторить тот же цикл, варьируя параметры избранных методов в зависимости от той части системы, к которой они применяются, и т.д. В качестве методов можно рассматривать: вид пробной функции, приближающей истинную волновую функцию электронов, или способ определения направления и частоты излучения фотона, или форма траекторий квантов амплитуд (см. Приложение 1). Переход к таким чисто алгоритмическим конструкциям при развитии моделирования представляется неизбежным.

В любом случае, для построения модели нам нужно иметь некоторое априорное представление о структуре и поведении моделируемой системы, которое затем будет совершенствоваться после просмотра пользователем "фильма", построенного на этих представлениях. Процесс отладки модели будет иметь итерационный характер, на каждом шаге которого мы будем иметь все более и более адекватные действительности представление о рассматриваемой эволюции. Именно такой процесс эволюции модели займет то место, которое традиционно занимает так называемое аксиоматическое построение квантовой физики (см. ([BS])). Это, разумеется, не означает никакого разрыва с традиционной квантовой теорией, а только изменяет акценты. Например, применение аппарата квантовой физики будет не основным инструментом, а только средством отладки моделирующих программ.

Целью настоящей статьи является обсуждение некоторых возможностей развития алгоритмической физики безотносительно к общей судьбе этого подхода. Такое обсуждение может представить интерес для тех, кто предпринимает попытки компьютерного моделирования процессов, в которых квантовые эффекты играют существенную роль.

2.2 Пользовательская и административная части модели

Как видно из изложенного выше, принципиальное отличие алгоритмического подхода от стандартного аналитического подхода вытекает из природы алгоритмов: в общем случае нет никакого способа узнать результат работы данного алгоритма над данным входным словом, кроме последовательного выполнения предписанных этим алгоритмом элементарных шагов¹³. Некоторые следствия этой удивительной особенности обсуждаются в следующем разделе, при более подробном изучении модели. Здесь же мы рассмотрим вытекающее из этого разделение модели на две части: пользовательскую и административную, которое можно рассматривать как разграничение прав доступа.

Поскольку модель должна давать динамическую картину поведения изучаемой системы, ее пользовательская часть должна содержать описание объектов, имеющих физический смысл - элементарных частиц. Административная часть модели содержит элементы, которым такого смысла приписать нельзя. Необходимость в административной части обосновывается известными экспериментами (см., например, ([As],[B]),[Be]), устанавливающими невозможность локального реализма в квантовой физике, или нарушение так называемых неравенств Белла.

Самый простой случай, показывающий необходимость введения в модель административной части, - это демонстрация запутанных состояний системы из двух частиц. Рассмотрим чистое состояние системы двух частиц ЭПР- типа:

$$\Psi = \alpha|0_10_2\rangle + \beta|1_11_2\rangle, \quad (1)$$

и попробуем отличить его от смешанного состояния ρ , в котором доля $|0_10_2\rangle$ и $|1_11_2\rangle$ составляет $|\alpha|^2$ и $|\beta|^2$ соответственно. Для придания этой задаче физического смысла будем считать, что $|0_j\rangle$ и $|1_j\rangle$ изображают пространственные положения j -й частицы, $j = 1, 2$. Интуитивный смысл запутанности

¹³Интересно, что этот тезис сохраняет силу и в том случае, если бы для предсказания работы классического алгоритма мы имели бы в своем распоряжении компьютер квантовый. Согласно результату ([Oz]) подавляющее число не слишком длинных классических вычислений не допускают квантового ускорения даже на один шаг.

состояния Ψ состоит в том, что у данных двух частиц одинаковыми являются не только координаты, но и импульсы; именно это и отличает состояние Ψ от смеси ρ . Если мы измерим только координаты обеих частиц в состоянии Ψ , то мы получим в точности тот же результат, который мы бы получили, если бы наша системы находилась бы в состоянии ρ , то есть таким измерением эти два состояния различить невозможно. Но если мы измерим импульсы обеих частиц, мы тут же обнаружим разницу между Ψ и ρ . Если в первом случае импульсы всегда окажутся одинаковыми, то во втором мы должны получить полный разброс в измеренных значениях, проистекающий из принципа неопределенности, примененного порознь к каждой из частиц, которые в состоянии ρ являются независимыми, и которые, следовательно, можно рассматривать как два экземпляра одной и той же частицы, которая находится то в состоянии $|0\rangle$, то в состоянии $|1\rangle$. Для доказательства надо перейти к импульсному представлению волновой функции. В выбранных нами дискретных обозначениях, характерных для квантового компьютеринга, преобразование Фурье, использующееся для перехода к импульсному представлению, можно заменить его первым приближением: преобразование Адамара, имеющим вид

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

которое применяется к каждому кубиту. Нетрудно проверить, что после применения этого преобразования к Ψ это состояние останется на месте, так что последующее измерение (которое будет уже измерением импульса) даст снова одинаковое значение для обоих кубитов. В случае же смеси ρ ситуация будет совершенно другой. Здесь преобразование Адамара, примененное к каждому кубиту, даст нам смешанное состояние, в котором с вероятностью $1/2$ присутствуют оба чистых состояния $\frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)$ и $\frac{1}{2}(|00\rangle - |01\rangle - |10\rangle + |11\rangle)$. Следовательно, в случае начального состояния ρ измерение импульса даст равновероятные распределения импульсов обеих частиц во всевозможных комбинациях. Можно проверить, что это останется верным, если мы возьмем первое приближение преобразования Фурье (с фазовым сдвигом на $\pi/2$) вместо нулевого приближения. Как видим, запутанные состояния принципиально отличаются от смеси незапутанных и это отличие может быть обнаружено в экспериментах не только над фотонами но и над массивными частицами.

Подытожив, мы заключаем, что, в отличие от потенциального поля, моделировать коллапс волновой функции и запутанные квантовые состояния невозможно, если основываться только на локальном взаимодействии частиц. Иными словами, для моделирования недостаточно пользовательской части модели; необходимо иметь административную часть, не имеющую физического смысла. Административная часть недоступна пользователям; в частности, они не могут узнать ее состояние в данный момент времени. В ней находится то, что обычно называется скрытыми параметрами моделируемой системы, только важно иметь в виду, что эти скрытые параметры не являются локальными - они относятся к пространственно удаленным точкам. Именно в этой части модели передается информация, которая определяет запутанность различных частиц. Этот тип информации недоступен для пользователей модели. Пользователи не могут обращаться к административной части непосредственно, скажем, для передачи друг другу задуманной ими информации. Заметим, что моделирование движущейся классической частицы возможно только тогда, когда она обладает ограниченной скоростью, которая определяется просто тактовой частотой процессора моделирующего компьютера. Дело в том, что нужно проследивать прохождение такой частицы через все узлы пространственной решетки на пути, и на каждый такой узел тратится фиксированное время. То есть в пользовательской части имеется ограничение на скорость перемещения частиц, которые можно моделировать. Таким образом, релятивистское ограничение на скорость передачи информации при алгоритмическом подходе вытекает из отсутствия у пользователя прав доступа к административной части модели¹⁴.

Мы трактовали разделение модели на две части как разграничение прав доступа. Для моделиро-

¹⁴Один из возможных путей моделирования релятивистского пространства-времени описан в Приложении 2.

вания необходимо, чтобы административная часть, во-первых, располагала полной информацией о том, что собирается делать пользователь модели, и во-вторых, имела бы в своем распоряжении мгновенный доступ к удаленным точкам физического пространства. Мы, там не менее, предполагаем, что и возможности административной части не беспредельны, а ограничены теорией классических алгоритмов. То есть доступная административной системе память растет линейно с ростом размеров моделируемого физического пространства. Это можно формализовать, используя многоголовочные машины Тьюринга, в которых мгновенность доступа означает применение правил, учитывающих состояния всех головок. Более подробно это описано в Приложении 2. Отметим здесь связь разграничения прав доступа с применимостью принципа "свободной воли". Приоритет, который в нашей модели имеет административная часть фактически означает, что "свободная воля" пользователя обусловлена исключительно его связями с внешним миром¹⁵. Если бы таких связей не было, то при достаточных вычислительных ресурсах можно было бы включить в модель и его самого.

2.3 Описание наблюдения. Получение правила Борна для квантовой вероятности

Правило Борна для вычисления квантовой вероятности имеет вид

$$p(A) = |\langle A|\Psi\rangle|^2, \quad (3)$$

где A есть некоторый вектор, принадлежащий базису e_1, e_2, \dots , определяющему измерение, $|\Psi\rangle$ - измеряемое состояние. (В физической терминологии e_1, e_2, \dots есть базис, состоящий из собственных векторов эрмитова оператора H , который задает данное измерение). Правило Борна является единственным звеном традиционного формализма, связывающим квантовую механику с классической, и оно в этом формализме принимается как аксиома. Эта аксиома не дает возможности получить единое описание квантовой динамики в таком формализме и делает всякое частичное описание зависимым от присутствия наблюдателя (фактически от его "свободной воли"). Именно поэтому не прекращаются попытки дать правилу Борна некое обоснование, или вывести его из более фундаментальных предположений. Центральным пунктом и причиной неудач в этом направлении было отсутствие классической урновой схемы для квантовой вероятности, которая бы сводила борновское правило к частотному определению вероятности, и которая бы была естественной с физической точки зрения (искусственное введение урновой схемы возможно, но это не очень интересно). Одну из последних попыток сделал Zurek (см. ([Zu])). Его предложение основано на операции обмена состояний (swap), приводящем к равенству модулей амплитуд элементарных исходов, что является не вполне естественным с физической точки зрения приемом (см. ([Mo], [SF])). Это предложение основано на стандартном подходе с гильбертовыми пространствами, в духе теоремы Глиссона ([G]), см. также ([CFS], [Bu])¹⁶. Приведенная ниже интерпретация принципиально отличается от данной Zureком тем, что она основана на кванте амплитуды, а не на операции swap.

Дадим объяснение правила Борна, исходя из концепции кванта амплитуды.

Рассмотрение квантовой эволюции с точки зрения многочастичного гильбертова формализма дает состояния вида

¹⁵Под внешним миром подразумевается не только макроскопическая и мегаскопическая вселенная, но и потенциальная микроскопическая вселенная, то есть структура элементарных частиц.

¹⁶Уже после написания данной работы мое внимание на интерпретацию Zureка и на цикл работ, связанных с ней и с теоремой Глиссона обратил А. Шеверев ([She]). Эта теорема состоит в том, что всякая неотрицательная функция на векторах гильбертова пространства размерности большей 2, являющаяся мерой на базисах этого пространства, имеет вид (3) для некоторого вектора Ψ . Ограничение размерности косвенно свидетельствует о том, что подобная общность для задач квантовой физики является излишней, так как в реальности мы всегда имеем дело с определенной волновой функцией (для размерности 2 контрпример строится элементарно, в то время как для описания одного кубита мы должны иметь дело именно с размерностью 2).

$$|\Psi\rangle = \sum_j \lambda_j |e_j\rangle, \quad (4)$$

где суммирование распространяется на бесконечное множество различных базисных состояний системы $|e_j\rangle$. Алгоритмический подход предполагает усечение этого ряда до конечной суммы, которое получается если мы отбросим все слагаемые с коэффициентами λ_j , по модулю меньшими некоторого заранее известного порогового значения ϵ . Такая сумма должна содержать не более $1/\epsilon^2$ слагаемых. Пусть N - число базисных состояний для одной частицы. Тогда мы можем считать, что $\epsilon = \frac{1}{\sqrt{N}}$. Таким образом, состояние будет иметь вид

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^N \lambda_j |e_j\rangle, \quad (5)$$

где некоторые слагаемые могут быть нулевыми.

Назовем редукцией уничтожение в записи состояния всех слагаемых, амплитуды которых по модулю меньше ϵ . Эту константу будем называть квантом амплитуды. По умолчанию, мы будем производить редукцию любого состояния, которое будет получаться в нашей модели по описываемым ниже правилам. Будем называть такие состояния допустимыми.

Сейчас мы продемонстрируем, как процедура редукции, заключающаяся в отбрасывании малых амплитуд, приводит к борновскому правилу для вычисления квантовой вероятности. Наша цель - в том, чтобы свести вычисление вероятности получения определенного базисного состояния A при измерении квантового состояния Ψ к применению классического правила

$$p(A) = \frac{N_{suc}}{N_{tot}}$$

где N_{suc} - число благоприятных исходов (то есть тех элементарных исходов, при которых реализуется событие A), N_{tot} - общее число элементарных исходов. Нам нужно определить множество всех элементарных исходов и установить соответствие между элементарными исходами и базисными состояниями измеряемой системы. Назовем элементарными исходами те состояния расширенной системы (измеряемая система + измерительный прибор), амплитуда которых в данном квантовом состоянии равна по модулю кванту амплитуды ϵ . Множество элементарных исходов будет, таким образом, зависеть от квантового состояния расширенной системы.

Если обозначать через $|\Psi_j\rangle$ базисные состояния измеряемой системы, а через $|\Phi_j\rangle$ базисные состояния измерительного прибора (который может быть, например, глазом наблюдателя), мы получим при контакте этих двух объектов состояние вида

$$\sum_j \lambda_j |\Psi_j\rangle \otimes |\Phi_j\rangle \quad (6)$$

Теперь, поскольку измерительный прибор очень массивен по сравнению с измеряемым объектом, при попытке описать его квантовые состояния мы вынуждены будем разбить состояния из (6) на сумму l_j базисных состояний (надо учесть, например, состояния всех входящих в измерительный прибор ядер, электронов и т.д.). То есть даже если при самом контакте у нас и имелось состояние

$|\Phi_j\rangle$, в результате эволюции вместо него очень быстро возникнет состояние вида $|\Phi'_j\rangle = \sum_{k=1}^{l_j} \mu_{j,k} |\phi_{j,k}\rangle$,

где со временем l_j будут очень быстро возрастать до тех пор, пока амплитуды по модулю не достигнут величины кванта амплитуды ϵ , после чего произойдет их обнуление. Следовательно, все модули амплитуд $\mu_{j,k}$ следует считать примерно одинаковыми. Если мы подставим выражение для $|\Phi'_j\rangle$ вместо $|\Phi_j\rangle$ в выражение (6), то амплитуды состояний $\phi_{j,k}$ будут равны $\frac{\lambda_j}{\sqrt{l_j}}$ в силу унитарности квантовой эволюции.

Мы обязаны производить процедуру редукции, которая заключается просто в отбрасывании состояний $\phi_{j,k}$ с малой по модулю амплитудой. Поскольку промежуток времени, в течение которого происходит описанное разбиение на огромное число слагаемых - ничтожно мало, то при вычислениях это будет фактически означать, что мы разбиваем каждое слагаемое в (6) на l_j новых слагаемых так, чтобы все получившиеся амплитуды были близки к кванту амплитуды и приблизительно одинаковы, так как именно это делает все состояния равноправными перед проведением редукции и дает возможность применить классическую урновую схему¹⁷. Но тогда количество l_j слагаемых с первым сомножителем $|\Psi_j\rangle$, что есть число благоприятных исходов, будет пропорционально $|\lambda_j|^2$, и если при редукции выживет только одно слагаемое, мы получим в точности правило Борна для квантовой вероятности.

Таким образом, вероятностное пространство зависит от выбора волновой функции $|\Psi\rangle$. Мы рассматриваем фактически условные вероятности получить при измерении тот или иной исход при условии, что система находится в состоянии $|\Psi\rangle$. Заметим, что несмотря на кажущееся сужение формулировки по сравнению с теоремой Глиссона, именно такое вероятностное пространство имеет физический смысл.

Приведенное объяснение борновского правила вычисления квантовой вероятности опирается только на наше определение редукции алгоритмического описания квантового состояния как отбрасывание малых амплитуд. Такая редукция выполняется и на каждом шаге моделирования унитарной эволюции просто потому, что без этой процедуры моделирование вообще будет невозможным. В нашем подходе специфика измерения по сравнению с унитарной эволюцией только количественная: это тот момент, когда наша система вступает в контакт с массивным объектом, который можно назвать окружением, что дает разбивку слагаемых в (6) на большое число новых слагаемых. Кроме этого естественного предположения мы использовали только нормировку волновой функции, сохранение которого вытекает из уравнения Шредингера. Таким образом, при нашем объяснении борновского правила мы не пользовались ничем, что выходило бы за рамки обычных предположений квантовой механики, за исключением только нашего определения редукции как отбрасывания слишком малых амплитуд. Заметим, что именно такая процедура редукции превращает набор фейнмановских траекторий в классическую траекторию движения в случае массивного тела (см. Приложение 1). Декогерентность мы трактуем как формирование запутанных состояний вида (6) с окружением, то есть не проводим никакого различия между ним и измерением рассматриваемой системы. Таким образом, закон Борна для квантовой вероятности и необратимая порча квантового состояния при декогерентности является следствием зернистости амплитуд. Мы видим, что алгоритмический подход дает единое описание унитарной эволюции и измерения, что дает независимое от присутствия наблюдателя описание квантовой динамики. Это является достоинством алгоритмического подхода, так как стандартный квантовый формализм не дает такого единого описания, и принципиально зависит от присутствия наблюдателя¹⁸.

При алгоритмическом моделировании мы, таким образом, вообще не обязаны специально учитывать то, что нашу систему кто-то наблюдает. Более того, сам наблюдатель (если таковой имеется, и если он никак не зависит от окружающей среды) может, в принципе быть включен в моделируемую систему без всякого изменения основного алгоритма. Единственное, что запрещает моделировать самого себя (что могло бы привести к неприятным последствиям логического свойства) - непреодолимое ограничение вычислительных ресурсов, поскольку для очень точного моделирования некоей системы нужна система значительно большая.

¹⁷Примерное равенство амплитуд перед редукцией также соответствует классической урновой схеме, основанной на квантах амплитуды; см. например, Приложение 1.

¹⁸Что сразу же ставит вопрос о том, какой объект обладает статусом наблюдателя. На эту парадоксальную сторону квантовой физики обращали внимание все, кто занимался основаниями квантовой теории. Важно то, что такая зависимость квантовой теории от непонятого объекта, служащего первопричиной декогерентности (и неопределенная трактовка самой декогерентности) лишала квантовую теорию возможности подчинить себе всю область молекулярных явлений, и прежде всего тех, что ответственны за функционирование живых организмов.

3 Иерархическая модель квантовой динамики

Центральным пунктом всего алгоритмического подхода является выбор подмножества состояний \mathcal{H} , моделируемой системы, описание которого не должно расти слишком быстро с числом частиц в ней. Приемлемой скоростью роста является линейная, поскольку только при такой скорости у нас имеется хотя бы теоретическая возможность в будущем (при создании самых мощных возможных классических компьютеров) создать "фильмы", описывающие поведение живой материи¹⁹. Выбор такого подмножества \mathcal{H} , представляет собой разрыв с многочастичным гильбертовым формализмом и с надеждой моделировать масштабируемые квантовые компьютеры. Данное подмножество не будет являться подпространством, так как в развиваемом подходе мы берем за основу не аналитические свойства, как линейность, а возможность описания эволюции эффективными алгоритмами. С точки зрения традиционной квантовой механики это также значит, что мы выбираем форму приближения к решению многочастичного уравнения Шредингера. Здесь есть слишком большая неопределенность, чтобы мы могли применять чисто алгоритмические приемы вроде генетических алгоритмов, и мы вынуждены явно указать способ выбора такого подмножества. Мы будем исходить из очевидного для алгоритмического подхода ограничения на сложность записи квантовых состояний n частичной системы, которое состоит в том, что длина такой записи в терминах сумм и тензорных произведений должна быть ограничена некоторой константой²⁰. Естественно предположить, что такая константа должна линейно зависеть от n . Мы укажем, каким образом можно было бы моделировать квантовую динамику в рамках таких состояний. Мы приведем некоторые эвристические соображения в пользу этого выбора, которые отчасти вытекают из особенностей алгоритмического подхода, а отчасти обобщают известный арсенал вычислительных приемов, используемых в квантовых расчетах. Главным таким соображением является то, что предлагаемый ниже способ выбора вида состояний в самой минимальной степени отличается от одночастичного описания в смысле алгебраической записи состояний.

Прямой метод моделирования заключается в следующем. Мы будем рассматривать не эволюцию волновой функции $|\Psi(t)\rangle$, а эволюцию пары вида $|\Psi(t)\rangle, P(t)$, где $P = \{\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_L\}$ есть множество точек деления конфигурационного пространства для многочастичной системы, такое что плотность этих точек пропорциональна квадрату модуля волновой функции: $\rho(t) \equiv \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle$, а их общее число $L = \frac{1}{g^2}$, где g - избранное значение для кванта амплитуды (которое гораздо больше существующего в природе). Для удобства можно считать, что точки деления расположены таким образом, что к ним применимы разностные схемы оператора Лапласа для каждой из частиц в рассматриваемой системе. Более того, можно считать, что для любого способа фиксации любых $s - 1$ частиц общее число точек деления и их густота для оставшейся частицы подчиняется такому же закону. Тогда $|\Psi(t + \Delta t)\rangle$ получается из $|\Psi(t)\rangle$ применением разностной схемы для уравнения Шредингера, а новый набор точек деления $P(t + \Delta t)$ получается из новой волновой функции согласно сформулированному условию густоты. Для уточнения значений волновой функции в промежуточных точках можно использовать методы аппроксимации (например, сплайнами). Такой метод опирается непосредственно на квант амплитуды и позволяет учесть запутанность любого типа между всеми частицами в рассматриваемой системе. Но именно поэтому он может быть неэффективен, так как реальное значение g может быть на много порядков меньше допустимого реальными суперкомпьютерами. Поэтому мы опишем более универсальный для вычислений подход, основанный на иерархии частиц, в который прямой метод войдет как составная часть в моменты перестройки этой иерархии.

Поскольку наша основная цель состоит в том, чтобы научиться показывать достоверные "фильмы", весь наш подход должен основываться на концепции частиц, которые и будут основными объектами таких "фильмов". Для общности рассмотрения мы должны иметь в виду, что каждая

¹⁹ Даже при квадратичной скорости подобные надежды исчезнут.

²⁰ См. работу ([Aa]).

частица (за исключением, быть может, фотона) может, в свою очередь, состоять из более мелких частиц, так что наш подход должен допускать такого рода масштабирование. Под частицами мы будем, таким образом, понимать не только элементарные частицы, но и группы элементарных частиц, например, ядра, атомы или молекулы, а также и более специальные группы, например, куперовские пары электронов, или квазичастицы, которые можно рассматривать как единые частицы. Это означает, что под частицами мы будем понимать все объекты, к которым можно применять понятие волновой функции и решать для них одночастичное уравнение Шредингера - единственный тип уравнений Шредингера, который можно решить, применяя классические вычислительные машины. Надо выделить класс наибольших частиц, которые рассматриваются в нашей модели - они будут иметь уровень 0, а наибольший уровень имеют частицы, которые нельзя разделить на части с использованием рассматриваемых взаимодействий. Мы ограничим наше рассмотрение электромагнитными полями, так что частицами наибольшего уровня вложенности для нас будут электроны, фотоны и атомные ядра²¹.

Рассмотрим две задачи: моделирование унитарной эволюции волновой функции, то есть действие оператора $\exp(-\frac{iH}{\hbar}t)$, и вычисление собственных функций $|\phi_k\rangle$ гамильтониана H . Подсчитаем, сколько действий надо совершить при решении этих задач прямым счетом. Для простоты ограничимся системой из 2 частиц. Для системы из двух частиц общее число базисных состояний будет N^2 . Матрица гамильтониана имеет размерность $N^2 \times N^2$ и общее число действий будет для одного шага эволюции N^4 , а для промежутка времени t общее число шагов не может быть меньше N^2t , что имеет место для конечно-разностного метода решения уравнения Шредингера. Для задачи поиска собственных функций надо решать характеристическое уравнение для матрицы порядка $N^2 \times N^2$, что требует порядка N^{12} шагов. Если мы рассматриваем пространственную сетку с 10 шагами по каждому измерению, что является наименьшей приемлемой точностью описания одной частицы, мы будем иметь $N = 1000$ и вычисление собственных функций двухчастичного гамильтониана потребует 10^{36} операций, что делает прямой метод неприемлемым ни для каких суперкомпьютеров, даже для частных задач, в которых гамильтониан имеет симметричную форму. При практических вычислениях для таких задач используется либо метод функционалов плотности (см. ([LA])), либо метод самосогласованного поля Хартри-Фока. Этот метод исходит из представления волновой многочастичной функции для системы из n идентичных фермионов в виде детерминанта Фока-Слетэра (см. ([SI])).

Это означает, что мы учитываем запутанность частиц, происходящую из их обменного взаимодействия, но не учитываем запутанности, которая может происходить из-за кулоновского взаимодействия между ними. Для учета такого рода запутанности следует записывать волновую многоэлектронную функцию в виде суммы детерминантов вида (16):

$$\sum_j \mu_j |\Psi_j\rangle. \quad (7)$$

Однако такое представление содержит бесконечный ряд и прямое обобщение метода Хартри-Фока на этот случай даст вместо компактного метода необозримую задачу, так как у нас нет критерия выбора коэффициентов ряда (7), в частности, если какой-то из таких коэффициентов достаточно большой по сравнению с ϵ , мы не сможем учесть соответствующее ему слагаемое. Метод функционалов плотности не учитывает запутанности вообще; он хорош для задач, в которых волновые функции имеют примерно одинаковую плотность (например, для электронов в металле), но для атомных и молекулярных расчетов этот метод дает большую ошибку. Мы опишем метод, позволяющий максимално учесть запутанность любого происхождения между разными частицами в предположении, что реальный квант амплитуды g намного меньше значения ϵ , которое мы будем

²¹ Хотя развиваемый подход применим, по видимому, и к ядерным взаимодействиям. Во всяком случае, в иерархической модели заложена возможность масштабирования в направлении увеличения "глубины вложенности" частиц. Это очень удобно для единого описания разных типов взаимодействий, скажем электромагнитного и ядерного.

считать равным $\frac{1}{\sqrt{T}}$, где T есть число шагов самого быстрого из суперкомпьютеров за максимальное время, имеющееся в нашем распоряжении. При этом число шагов, требуемое для диагонализации гамильтониана будет иметь порядок $N^{\frac{7}{3}}$, что фактически близко к числу шагов, необходимых для простого сканирования области определения волновой функции.

Наибольшие частиц мы будем называть частицами нулевого уровня. Это могут быть многоатомные молекулы, то есть те объекты, которые доступны непосредственному наблюдению. Частицами первого уровня будем называть наиболее крупные куски частиц нулевого уровня, и т.д. Вообще, частица n го уровня представляет собой набор, состоящий из частиц уровня $n + 1$. Таким образом, выбор частиц n -го уровня означает выбор способа группировки частиц более высокого уровня, и представляет собой на первом шаге задачу пользователя модели; для дальнейших шагов мы сформулируем правило для изменения этой иерархии. Общая рекомендация состоит только в том, что в результате такого определения частиц должны получаться объекты, к которым применимо понятие волновой функции и одночастичное уравнение Шредингера. Таким образом, каждая частица a уровня n имеет свои пространственные координаты x_a, y_a, z_a и спиновую координату s_a . Эти координаты часто можно считать координатами центра масс C_a системы частиц следующего уровня, образующих a . Пусть a_1, a_2, \dots, a_s - частицы уровня $n + 1$ образующие a . Их координаты в системе координат, начальная точка которой совпадает с C_a называются относительными координатами.

В дальнейшем мы будем применять кубитовую запись волновых функций $|\Psi(\bar{r})\rangle$ в виде

$$\sum_{\bar{r}} \lambda_{\bar{r}} |\bar{r}\rangle \quad (8)$$

где \bar{r} есть двоичная запись численного значения координат всех частиц, входящих в рассматриваемую систему; пусть длина этого кортежа n . Здесь значение обычной волновой функции $\Psi(\bar{r})$ просто пропорционально $\lambda_{\bar{r}}$. Сейчас мы будем рассматривать естественный лексикографический порядок на кортеже \bar{r} , который в точности соответствует одночастичному одномерному случаю, но наше рассмотрение будет на самом деле совершенно общим.²² Поскольку мы договорились, что всякая частица уровня $k - 1$ расположена в центре масс системы образующих ее частиц уровня k , в группе этих частиц задание координат всех кроме одной определяют координаты и этой одной (в системе их центра масс). Эти частицы, координаты которых могут быть произвольны, называются значимыми. Пусть $k = 0, 1, \dots, n$ нумерует уровни иерархии. Обозначим через \bar{r}_k начальный отрезок последовательности \bar{r} длины k , а через r_k - k -й элемент этой последовательности, имеющий вид списка $r_k = (r_k^1, r_k^2, \dots, r_k^{s_k})$, где r_k^j есть относительные координаты j -й значимой частицы уровня k , а s_k - число таких частиц; например, если в каждой частице есть ровно две частицы следующего уровня, то $s_k = 2^{n-k-1}$. Если не используются верхние индексы, можно для простоты считать, что r_k вообще представляет собой один кубит - это просто облегчит наши обозначения. Всякую волновую функцию вида (8) можно представить в виде

$$\sum_{r_1} \left(\lambda_{r_1} |r_1\rangle \otimes \sum_{r_2} \left(\lambda_{r_2} |r_2\rangle \otimes \dots \otimes \sum_{r_n} \lambda_{r_n} |\bar{r}_n\rangle \right) \dots \right) \quad (9)$$

Для этого можно, например, просто взять все $\lambda_{\bar{r}_j}$ равными единице при $j = 1, 2, \dots, n - 1$, а при $j = n$ положить равным $\lambda_{\bar{r}}$ из формулы (8).

Если рассмотреть фиксированное значение j , распределение амплитуд $\lambda_{\bar{r}_j}$ можно трактовать как некоторую волновую функцию; мы предполагаем, что она нормирована. В соответствии с нашим соглашением, она задается некоторым эффективным алгоритмом f_j , код которого мы обозначаем через $[\bar{\lambda}_{\bar{r}_j}]$, так что $f_j(\bar{r}_j) = \lambda_{\bar{r}_j}$. Пусть K_j обозначает множество кортежей вида \bar{r}_j , и пусть F_j такая

²²Представление волновых функций в виде (8) гораздо удобнее, чем в традиционном для физиков виде $\Psi(\bar{r})$, поскольку этот последний вид неоднозначен; так обозначаются две разные вещи: волновая функция и ее значение в конкретной точке \bar{r} (так что для разделения этих двух смыслов физики часто пишут интегралы с дельта-функциями).

функция на K_{j-1} , что $F_j(\bar{r}_{j-1}) = [f_j]$. Мы будем рассматривать только такие состояния, у которых все функции F_j при $j = 1, 2, \dots, n$ могут быть заданы некоторым конечным и фиксированным набором \mathcal{A} эффективных алгоритмов. Поскольку задание всех функций F_j однозначно определяет состояние, все такие состояния будут задаваться конечным набором эффективных алгоритмов, причем длина кодирования каждого из таких состояний будет линейно зависеть от n , то есть от числа частиц в рассматриваемой системе. Заметим, что, в силу последнего замечания, выделенные нами состояния являются всего лишь небольшим подклассом всех состояний (при предположении о зернистости амплитуд). Однако вычисления с приведенным классом состояний не требуют непосредственного хранения в памяти кванта амплитуды; вместо этого надо хранить коды алгоритмов, порождающие распределения амплитуд, что дает возможность работать с гораздо меньшими квантами амплитуд, чем позволяет память.

Введем еще ряд подклассов, путем наложения ряда дополнительных условий. Во-первых, пусть все функции F_j реально зависят не от всего кортежа \bar{r}_{j-1} , а только от координат $r_{j-p}, r_{j-p+1}, \dots, r_{j-1}$, то мы назовем множество таких состояний подклассом глубины p . Подкласс состояний глубины 0 есть просто незапутанные состояния. Если все распределения $\lambda_{\bar{r}_j}$ устроены так, что в этих кортежах есть только один ненулевой элемент, то мы получаем подкласс состояний, состоящий из базисных состояний нашей системы.

Обозначим через $|\Psi_{\bar{r}_k}\rangle$ волновую функцию $\sum_{r_k} \lambda_{\bar{r}_k} |r_k\rangle$, которая как видно из определения зависит от выбора \bar{r}_{k-1} . Это будет волновой функцией системы всех частиц уровня k , которая зависит от выбора координат частиц более низких уровней. Сейчас мы опишем эту зависимость более детально. Пусть A есть эрмитов оператор в пространстве состояний системы S_k частиц уровня k . Тогда его среднее значение определяется согласно квантовому правилу

$$\langle A \rangle_{\Psi_{\bar{r}_k}} = Tr (A |\Psi_{\bar{r}_k}\rangle \langle \Psi_{\bar{r}_k}|). \quad (10)$$

В частности, мы можем найти среднее положение любой составной части системы S_k , а также потенциал $V_k(r)$, создаваемый этой системой в точке r . Если имеется внешний потенциал V , мы можем тогда определить тот потенциал $V'(\bar{r}_{k-1}) = V + V_k(r)$, который действует на частицы уровня $k - 1$. Если у нас сначала заданы собственные функции для частиц уровня n , мы можем таким образом составить гамильтониан для частиц уровня $n - 1$; найдя его собственные функции составить гамильтониан для частиц уровня $n - 2$, и так далее, вплоть до самых крупных частиц уровня 0. Абсолютная координата любой частицы уровня k получается как сумма вложенных друг в друга частиц, начиная от нее до уровня 0. Тогда получится, что задание координат частиц уровней $k - 1, k - 2, \dots, 0$ определит распределение амплитуд для уровня k , что и требуется в нашем определении.

Таким образом, можно реализовать шаг унитарной эволюции для состояния иерархической системы с помощью какого-либо численного метода, например, конечно-разностного. Для частиц одного уровня, входящих в один ярус, мы, таким образом, применяем метод прямого моделирования. Важно только, чтобы операции, которые производятся над распределениями амплитуд при этом моделировании и результирующие распределения входили в множество \mathcal{A} избранных эффективных алгоритмов.

Если мы ограничим числом L общее число точек в пространстве, (или зафиксируем пространственное зерно), количество собственных функций любого уровня и максимальное число частиц в любом наборе S_j , то память, необходимая для записи всякого состояния вида (9), будет расти как степенная функция от числа частиц максимального уровня N , причем показатель степени будет зависеть от L . Поэтому иерархическое представление волновых функций, которое дается формулой (9), уже не будет эквивалентно многочастичному гильбертову формализму, при котором рост памяти должен быть экспоненциальным. Тем не менее иерархическое представление многочастичных состояний дает принципиальную возможность масштабировать квантовое моделирование не только для систем, состоящих из элементарных частиц (атомы, молекулы), но и внутри самих элементарных частиц, учитывая, в идеале, все возможные типы запутанности.

Теперь мы опишем, как определенная нами иерархия меняется во времени.

1.) Опускание частицы в иерархии на одну ступень. Предположим, что для состояния вида (9) моделирование унитарной эволюции (с обязательными редукциями) привело к тому, что состояние одной из частиц уровня k в каждой из функций вида $|\Psi_{\vec{r}_{k-1}}\rangle$ выделяется в виде тензорного произведения. Тогда мы объявляем эту частицу частицей уровня $k - 1$ с соответствующей перестройкой амплитудных распределений. Теперь эта частица будет взаимодействовать с другими частицами уровня $k - 1$ в соответствии с гамильтонианом уровня $k - 1$.

Таким образом можно описывать, отрыв электрона от молекулы под действием кулоновского притяжения соседнего иона или поглощенного фотона. Если у нас первоначально имелись два электрона в состоянии Фока-Слэтера, и при унитарной эволюции и редукциях расстояние между средними значениями их одночастичных функций растет, детерминант превращается в одно слабое и при редукции мы будем иметь описанную ситуацию. Аналогичный путь рассмотрения ситуации с поглощением фотона. Здесь надо рассматривать состояние вида

$$\sum_j \lambda_j |\Psi_j, \phi_j\rangle, \quad (11)$$

где $\phi_j \in \{ \text{photon in state } \psi_j, \text{ no photons} \}$ (см. ниже).

2.) Поднятие частицы a в иерархии на одну ступень. Такой процесс обратен предыдущему и связан с образованием новой запутанности между частицами, которые прежде были незапутанными. Частица a при этом включается в ярус, подчиненный одной из частиц - b , с которой она прежде входила в один ярус. Критерий, определяющий момент такого шага состоит в следующем. В течение моделирования динамики системы двух частиц a и b как системы двух взаимодействующих частиц их состояние становится запутанным с точностью моделирования и эта запутанность сохраняется на протяжении нескольких шагов. Этот критерий требует прямого многочастичного моделирования. Если мы хотим обойтись только одночастичными задачами, можно использовать другой критерий:

К). При моделировании динамики системы частиц a и b как системы независимых классических частиц получается, что задание координат и скорости одной из них определяет координаты и скорость другой с той точностью, с которой производится моделирование.

Перестройка иерархии является наиболее сложной операцией при моделировании, так как она устанавливает запутанность между частицами, которые прежде были независимы. Такая перестройка представляет собой вычислительный прием, поскольку запутанность, которая первоначально возникает при непосредственном моделировании многочастичной системы (квантовом или классическом) превращается в иерархическую запутанность после размещения начала системы координат в центр масс прежде незапутанной системы.

Замечание. Мы могли бы также ввести специальную процедуру измерения, которая производится в тот момент, когда пространственный носитель волновой функции некоторой частицы становится несвязным, то есть распадается на несколько компонент связности D_1, D_2, \dots, D_k . Измерение тогда заключалось бы в проекции волновой функции на одну из этих областей по борновскому правилу. Однако такая процедура, в отличие от определенной нами процедуры редукции, не соответствует никакому вычислительному принципу, и не отвечает никакому реальному процессу; значение такой процедуры было бы чисто эстетическим, так как сохранялась бы связность носителя волновой функции (что имеет некоторое косвенное отношение к экономии вычислительного ресурса). При распаде на разные (и далеко отстоящие друг от друга) компоненты связности применимо общее описание процесса измерения, приведенное ниже. Это общее описание основано только на редукции, и не нуждается ни в каких дополнительных определениях. Именно поэтому мы и не вводим такой специальной процедуры.

Теперь мы определим разбиение конфигурационного пространства для частиц в иерархии. Если мы расположим точки деления конфигурационного пространства равномерно, это создаст много лишней работы, так как большая часть базисных состояний будет иметь амплитуду меньшую ϵ и соответствующие слагаемые исчезнут при редукции. С другой стороны, в области больших по модулю

амплитуд точки разбиения должны быть расположены чаще, так как именно эти области влияют на эволюцию в наибольшей степени. При переходе от принятого в анализе дискретного представления непрерывных функций с помощью разбиения интервала точками деления x_1, x_2, \dots, x_k к кубитовому представлению (5) надо выбрать точки разбиения рассматриваемого интервала, так, чтобы попадание частицы при измерении в один из интервалов разбиения соответствовало определенному базисному состоянию в линейной комбинации. Этого можно достичь, если использовать не равномерное распределение точек деления по всему интервалу, а переменное. Как плотность распределения точек разбиения должна зависеть от волновой функции для того, чтобы минимизировать вычислительный ресурс при моделировании унитарной эволюции? Если исходить из классической урновой модели для квантовой вероятности (см. ниже), надо размещать эти точки так, чтобы они соответствовали элементарным исходам. Именно, пусть $\rho(x)$ - плотность точек деления конфигурационного пространства. Если $\lambda(x)$ - значение волновой функции в ее непрерывном представлении, то должно выполняться условие $\rho(x) = C |\Psi(x)|^2$ с некоторой константой C . В этом случае заданная в начале вычисления нормировка волновой функции будет сохранена автоматически. Этот прием переменной густоты точек деления даст нам и наилучшее соответствие с процедурой редукции вектора состояния, при котором отбрасываются слишком малые амплитуды. Идею переменной плотности точек разбиения можно обобщить и на иерархическое представление многочастичной квантовой системы.

Рассмотрим для простоты случай двух частиц 2 уровня, образующих частицу 1 уровня. (Обобщение на случай большего числа частиц не представляет никаких затруднений.) Тогда точки деления для конфигурационного пространства частицы уровня 1 распределены в соответствии с нашим соглашением о густоте и их общее количество - $[1/\epsilon^2]$. Если x - точка деления конфигурационного пространства для частицы уровня 1, которой соответствует амплитуда λ , то число точек деления конфигурационного одночастичного пространства частиц уровня 2 будет $[\frac{\lambda}{\epsilon}]$. Унитарная эволюция моделируется итерированием двух шагов: а) эволюция частиц 2 уровня при неподвижной частице 1 уровня, и б) моделирование сдвига частицы 1 уровня при неподвижных (в ее системе координат) частицах 2 уровня. Тогда моделирование эволюции потребует такого же числа шагов, как и при равномерном разбиении конфигурационного пространства, но в областях большей плотности точки разбиения будут расположены гуще, что больше соответствует идеологии моделирования, чем равномерное распределение точек деления.

Описание состояний ансамблей одинаковых частиц высоких уровней вложенности (например, электронов) целесообразно бывает давать в терминах энергетических уровней а не координат, поскольку такие частицы испускают фотоны, что меняет их состояния. Это не меняет общей схемы иерархического описания, за исключением того, что собственное состояние гамильтониана относится ко всему ярусу и под базисными состояниями $|\vec{r}\rangle$ мы должны понимать не пространственные координаты, а собственные состояния для гамильтонианов. При определении абсолютных координат частиц высокого уровня вложенности надо, разумеется, переходить от энергетического представления волновых функций к координатным, но это вряд ли может для чего-то понадобиться.

Нахождение собственных состояний требует применения прямого метода моделирования, который мы сейчас и рассмотрим. Мы исходим из известного факта, что собственные функции Ψ подчиняются следующему уравнению

$$\frac{\delta}{\delta\Psi} E(\Psi) = 0, \quad E(\Psi) = \int \Psi(r)^* H \Psi(r) dr \quad (12)$$

Это уравнение в вариациях волновой функции Ψ эквивалентно системе обыкновенных уравнений вида

$$\frac{\partial}{\partial\lambda_j} E(\Psi) = 0 \quad (13)$$

для всех j , где волновая функция Ψ рассматривается как функция от аргументов λ_j . Практически система (13) решается последовательностью шагов. На каждом шаге мы выбираем направле-

ние наибольшего возрастания функции $E(\Psi)$. Реализация каждого шага требует числа операций, пропорционального числу M всех точек разбиения общего конфигурационного пространства, где $M = N^k$, N - число точек разбиения одночастичного пространства, k - число частиц. Общее число шагов имеет порядок $N^{\frac{1}{3}}$, что дает общее число операций порядка $N^{k+\frac{1}{3}}$. Для многочастичной задачи начальные функции проще всего выбрать (как это обычно делается) в виде тензорного произведения одночастичных:

$$\Psi(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_k) = \Psi_{i_1}(\bar{r}_1)\Psi_{i_2}(\bar{r}_2) \dots \Psi_{i_k}(\bar{r}_k). \quad (14)$$

Описанный метод минимизации энергии применяется сначала с условием того, что общая волновая функция имеет вид (14). Это означает, что мы варьируем функции Ψ_{i_j} , отыскивая минимальное значение энергии. После того, как минимум в терминах этих функций найден, мы переходим к кубитовому представлению волновой функции (то есть к виду (9)), и начинаем минимизацию с продвижением в область запутанных состояний.

Некоторую сложность представляет прямое моделирование квантовой динамики частиц одного яруса, для которых нельзя естественно ввести иерархический порядок, это касается, например, многоэлектронных состояний в атомах и молекулярных структурах. Поскольку алгоритмическая реализация прямого моделирования весьма ресурсоемка²³ мы опишем здесь один прием, позволяющий существенно упростить моделирование.

Главная идея излагаемого приема в том, чтобы учитывать при такой минимизации не все вариации волновой функции, а только те, которые относятся к базисным состояниям, входящим в ее запись с достаточно большой амплитудой. При этом мы будем хранить волновые функции в форме, максимально близкой к (14). Мы будем говорить о представлениях функций в виде формул, подразумевая при этом, что операции над данной функцией при моделировании производятся в точном соответствии с этой формулой. Условимся, что в тензорных произведениях одночастичные функции всегда нумеруются в некотором фиксированном порядке, а в кубитовом представлении всякой одночастичной функции в виде суммы по значениям координат эти значения тоже выбираются в строго определенном порядке (например, лексикографическом). Спиновую координату мы не будем отделять от пространственных. Если задана функция $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_k)$, будем называть ее симметризацией функцию вида $a \sum_{\pi} \Psi(r_{\pi(1)}, r_{\pi(2)}, \dots, r_{\pi(k)}) (-1)^{\sigma(\pi)}$, где суммирование производится по всем перестановкам π , $\sigma(\pi)$ обозначает в случае фермионов четность перестановки, а в случае бозонов единицу, a - нормировочный множитель. Хранение волновой функции в виде тензорного произведения

$$|\Psi\rangle_{ind} = |\Psi_1(\bar{r}_1)\rangle \otimes |\Psi_2(\bar{r}_2)\rangle \otimes \dots \otimes |\Psi_k(\bar{r}_k)\rangle \quad (15)$$

гораздо экономичнее, чем в виде $\sum_{\vec{i}} \lambda_{i_j} |j\rangle$, поскольку в последнем случае сумма распространяется на экспоненциально большое число слагаемых. После симметризации (15) получится волновая функция в виде

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \mathcal{D}(|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, \dots, |\Psi_k\rangle; \bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_k) \quad (16)$$

, где \mathcal{D} является детерминантом или перманентом, в зависимости от типа симметрии системы (фермионная или бозонная), построенным на волновых функциях и координатах. Обозначим через $Sym|\Psi\rangle$ результат симметризации волновой функции $|\Psi\rangle$ фермионного или бозонного типа. Тогда функцию вида (16) можно записать как $Sym(|\Psi\rangle_{ind})$. Такую симметризацию можно применить к любым волновым функциям, в том числе и к заданным в кубитовой форме, где это означает вычисление определителей или перманентов от коэффициентов λ_j^s , где s - номер частицы, j - номер базисного состояния. Мы рассмотрим здесь только фермионные ансамбли. Поскольку вычисление

²³ Многомерные сетки переменной плотности могут просто строиться только в случае незапутанных состояний. Для запутанности общего вида постоение таких сеток представляет определенные затруднения.

детерминантов для заданных значений координат является задачей полиномиальной сложности от числа частиц, то наличие процедуры симметризации в моделирующем алгоритме не выводит нас за рамки эффективных алгоритмов.

Назовем волновые функции вида $Sym(|\Psi_1(\bar{r}_1)\rangle \otimes |\Psi_2(\bar{r}_2)\rangle \otimes \dots \otimes |\Psi_k(\bar{r}_k)\rangle)$ функциями нулевого ранга запутанности. Эти функции с алгебраической точки зрения являются запутанными, так как их нельзя представить в виде тензорного произведения. Но хранение таких волновых функций не требует практически никаких дополнительных затрат по сравнению со случаем незапутанных функций вида (15), что и оправдывает их название.

Назовем представление волновой функции каноническим, если оно имеет вид

$$|\Psi_{can}\rangle = Sym\left(\sum_{j \in J} \lambda_j |\Psi_j\rangle\right), \quad (17)$$

где выполнены такие условия:

- Все состояния $|\Psi_j\rangle$ являются k -частичными взаимно ортогональными нормированными состояниями.
- Любое состояние $|\Psi_j\rangle$ имеет представление $\bigotimes_{h \in H(j)} |\Psi_{j,h}\rangle$, причем для всякого $j \in J$ либо $H(j)$ состоит из одного элемента и $|\Psi_{j,h}\rangle$ базисное состояние нашей системы (каждая частица в определенной координате) вида $|\bar{r}\rangle$, либо $H(j)$ состоит из k элементов $h_1(j), h_2(j), \dots, h_k(j)$ и каждая $|\Psi_{j,h}\rangle$ является одночастичной нормированной волновой функцией вида $\sum_l \lambda_l^{j,h} |l\rangle$.

Алгоритмический подход налагает полиномиальное ограничение на число элементов в множестве J . В силу первого условия ортогональности для любой пространственной (и спиновой) конфигурации $|\bar{r}\rangle = |r_1, r_2, \dots, r_k\rangle$ рассматриваемой системы если $\langle \bar{r} | \Psi_{can} \rangle \neq 0$, то существует не более одного значения j , такого что

$$\langle \bar{r} | \Psi_{can} \rangle = \lambda_j \lambda_{r_1}^{j,h_1(j)} \lambda_{r_2}^{j,h_2(j)} \dots \lambda_{r_k}^{j,h_k(j)} \quad (18)$$

Тогда мы можем выбрать такие комбинации значений j , и r_1, r_2, \dots, r_k что амплитуда базисного состояния \bar{r} в $|\Psi_{can}\rangle$ $\langle \bar{r} | \Psi_{can} \rangle$ будет не меньше по модулю, чем наш выбранный для вычислений квант амплитуды g . Выбор одной такой комбинации можно сделать за логарифмическое по $1/g$ число шагов при неограниченном увеличении k и фиксированном числе элементов в J . Действительно, надо просто перебирать все явно выписанные амплитуды в состоянии (17) в порядке убывания их модулей; при этом в результате умножения в (18) результирующая амплитуда будет убывать экспоненциально, и мы за логарифмическое число шагов доберемся до g . Таким образом, мы можем за степенное время от $1/g$ перебрать все достаточно большие амплитуды в каноническом представлении состояния, несмотря на то, что простое раскрытие тензорных произведений даже при фиксации g даст представление состояния длины, экспоненциально растущей по числу точек разбиения конфигурационного пространства.

Пусть у нас имеется каноническое представление состояния ранга d вида (17). Опишем, как из него получить каноническое представление нового состояния ранга $d+1$. Выберем какую-либо пространственную конфигурацию $r_1^0, r_2^0, \dots, r_k^0$ по указанному выше правилу, так, чтобы данное базисное состояние не было бы простым слагаемым в (17). Тогда ему соответствует значение j . Пусть для всякого $s = 1, \dots, k$ функция $|\Psi_{j,h_s(j)}\rangle$ имеет вид $|\Psi'_{j,h_s(j)}\rangle + \lambda_{r_s^0}^{j,h_s(j)} |r_s^0\rangle + |\Psi''_{j,h_s(j)}\rangle$ где $|\Psi'_{j,h_s(j)}\rangle$ (и $|\Psi''_{j,h_s(j)}\rangle$) - те слагаемые, которые содержат все предшествующие (все последующие) r_s^0 значения координат одной частицы. Представление функции $|\Psi_{can}\rangle$ в виде состояния ранга $d+1$ получится, если мы заменим в (17) слагаемое $|\Psi_j\rangle$ на выражение вида

$$\left(\sum_{s=1}^k \lambda_{r_1^0}^{j,h_1(j)} \lambda_{r_2^0}^{j,h_2(j)} \dots \lambda_{r_{s-1}^0}^{j,h_{s-1}(j)} |r_1^0, r_2^0, \dots, r_{s-1}^0\rangle \otimes (|\Psi'_{j,h_s(j)}\rangle + |\Psi''_{j,h_s(j)}\rangle) \otimes \bigotimes_{b=s+1}^k |\Psi_{j,h_b(j)}\rangle \right) + \lambda_{r_1^0}^{j,h_1(j)} \lambda_{r_2^0}^{j,h_2(j)} \dots \lambda_{r_k^0}^{j,h_k(j)} |r_1^0, r_2^0, \dots, r_k^0\rangle. \quad (19)$$

Подчеркнем, что речь идет о разной форме записи одной и той же волновой функции. Из (19) вытекает, что полученное такой подстановкой представление волновой функции является каноническим. Назовем главными значениями j те значения, для которых $H(j)$ состоит из одного элемента. Этому значению отвечает определенное значение координат всех частиц $\bar{r}(j)$. Можно легко произвести минимизацию энергии по амплитуде, которая соответствует этому значению; такая минимизация приведет к варьированию λ_j и соответствующей нормировке оставшихся амплитуд $\lambda_{j'}$ при $j' \neq j$; при этом все волновые функции $|\Psi_{j', \bar{r}_s(j')}\rangle$ останутся без изменений. Будем минимизировать энергию, начиная с состояний ранга 0. На каждом шаге d у нас будет состояние ранга d , энергию которого мы минимизируем при поочередной фиксации всех главных значений j , и варьирования соответствующих амплитуд. После этого надо выбрать такое представление полученного состояния ранга $d + 1$, у которого минимизация энергии с помощью нового главного значения ведет к изменению состояния, и т.д. Указанный процесс позволяет так производить минимизацию энергии, что на каждом шаге используется наиболее экономичное представление волновой функции. Если такой процесс минимизации на шаге d уже не дает уменьшения энергии при переходе к состояниям ранга $d + 1$, мы можем считать, что мы нашли стационарное состояние рассматриваемой системы при данном значении кванта амплитуды. Пусть $E_d^1, E_d^2, \dots, E_d^{f_d}$ - все энергии, полученные последовательной минимизацией вплоть до ранга d , начиная от состояния локального минимума энергии $E_{d'}$ в ранге $d' < d$, мы назовем величины вида $E_{d'} - E_d^{f_d}$ энергетическим дефектом. Величина энергетических дефектов является характеристикой того влияния, которое оказывает сложность запутанности квантовых состояний на их энергию при данном виде взаимодействия.

3.1 Прямое моделирование в форме вторичного квантования

Прямое применение указанного пути для многоэлектронных систем затруднительно в силу большой размерности гамильтонианов. Поэтому описанную схему минимизации энергии проще всего применить для волновых функций, представленных в форме вторичного квантования. Мы скажем, что частица, имеющая волновую функцию Ψ_j , принадлежит j энергетическому уровню. В этом случае функцию $Sym(|\Psi_1(\bar{r}_1)\rangle \otimes |\Psi_2(\bar{r}_2)\rangle \otimes \dots \otimes |\Psi_k(\bar{r}_k)\rangle)$ мы будем обозначать через $|\bar{n}\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle$, где n_j равно числу таких номеров l , для которых $i_l = j$ (населенность j уровня). Функции такого вида будут образовывать, по определению, ортонормированный базис пространства состояний. Общий вид волновой функции тогда будет иметь вид

$$\sum_{\bar{n}} \lambda_{\bar{n}} |\bar{n}\rangle. \quad (20)$$

Гамильтониан в этом пространстве имеет вид

$$H = \sum_{k,l} v_{k,l} c_k^\dagger c_l + \frac{1}{2} \sum_{k,l,m,n} v_{k,l,m,n} c_l^\dagger c_k^\dagger c_m c_n \quad (21)$$

где операторы рождения и уничтожения частицы уровня j имеют вид

$$\begin{aligned} c_j^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\rangle &= (-1)^{\sigma_j(\bar{n})} (1 - n_j) |n_1, n_2, \dots, n_j + 1, \dots\rangle \\ c_j |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\rangle &= (-1)^{\sigma_j(\bar{n})} n_j |n_1, n_2, \dots, n_j - 1, \dots\rangle \\ \sigma_j(\bar{n}) &= n_1 + n_2 + \dots + n_{j-1}, \end{aligned}$$

для фермионов, и $\sigma_j(\bar{n}) = 1$ для бозонов, а матричные элементы переходов имеют вид

$$\begin{aligned} v_{k,l} &= \langle \Psi_k | \frac{p^2}{2m} + V_1 | \Psi_l \rangle \\ v_{k,l,m,n} &= \langle \Psi_l, \Psi_k | V_2 | \Psi_m, \Psi_n \rangle \end{aligned}$$

и считаются через интегрирование по пространственным степеням свободы и суммированием по спиновым стандартным образом (здесь при сопряжении тензорного произведения меняется порядок записи его компонент), V_1 , V_2 - одночастичный и двухчастичный потенциал, p - оператор импульса.

В этом формализме наш процесс минимизации энергии будет выглядеть так. Мы стартуем с некоторого состояния $|\bar{n}\rangle$, которое зависит от выбора функций Ψ_j . Малыми вариациями собственных функций Ψ_j мы добиваемся, чтобы энергия состояния $|\bar{n}\rangle$ имела бы локальный минимум при данном наборе этих функций $\Psi_1^0, \Psi_2^0, \dots, \Psi_L^0$. После этого мы фиксируем базис в пространстве чисел заполнения и начинаем минимизацию энергии, переходя к нетривиальным линейным комбинациям вида (20). На каждом шаге d мы имеем функцию вида $|\Psi_d\rangle = \sum_{\bar{n}} \lambda_{\bar{n}}^d |\bar{n}\rangle$. Для всех \bar{n} в порядке

убывания модулей их амплитуд мы производим минимизацию энергии вдоль таких направлений вида $|\bar{n}\rangle + \lambda|\bar{n}'\rangle$, для которых $|\bar{n}'\rangle = c_k^+ c_l^+ c_m c_n |\bar{n}\rangle$ для каких-либо сочетаний k, l, m, n . Получившееся состояние обозначаем через $|\Psi_{d+1}\rangle$. Итерация описанных шагов дает минимизацию энергии, и, соответственно, собственные состояния Гамильтониана (21). Величина дополнительного выигрыша по сравнению с базисными состояниями составляет энергетический дефект.

Покажем в общих чертах, какой алгоритм моделирования унитарной динамики дает описанный подход для молекулы водорода. Это система двух протонов и двух электронов, которая движется в переменном внешнем электромагнитном поле. Рассмотрение такой задачи требует учета динамики поля, которое подчиняется уравнениям Максвелла. Мы не будем рассматривать здесь этот пример во всей его общности, а пренебрежем вкладом в энергию, порожденным спинами рассматриваемых частиц, а также векторным электромагнитным потенциалом. Таким образом, мы будем учитывать только кулоновские силы, а спины электронов будут проявляться только через принцип Паули. Распределение частиц по уровням зависит от конфигурации данной системы и может изменяться со временем согласно нашим правилам. Например, при рассмотрении реакции соединения двух атомов водорода в молекулу первоначально частицами третьего уровня будут электроны и протоны, второго уровня - пары протон + электрон, первого - объект, состоящий из этих двух частиц второго уровня, то есть будущая молекула. Поскольку протоны гораздо тяжелее электронов, можно считать, что протоны с самого начала частицы 2 уровня, а электроны - третьего, причем каждый из них принадлежит ярусу своего протона. В стационарном состоянии молекулы водорода иерархия будет выглядеть несколько по-другому. Частицами третьего уровня будут электроны, частицы второго уровня: пара электронов, а также каждый из протонов, частица первого уровня - сама молекула. Если пренебрегать излучением фотонов, моделирование динамики такой системы выглядит так. Для произвольного но фиксированного положения протонов мы вычисляем один шаг конечно-разностного метода моделирования динамики электронов. Осуществляем эту процедуру для всех положений протонов, распределяя густоту точек деления в соответствии со сформулированным выше правилом. После чего делаем один шаг в конечно-разностном методе моделирования динамики протонов, после чего итерируем описанную двухшаговую процедуру. Поскольку волновая функция протонов будет меняться гораздо медленнее волновой функции электронов, мы можем произвести много шагов конечно-разностного метода для электронов, считая протоны фиксированными. При таком подходе изменение иерархии может и не произойти (это зависит от начальных условий, и молекула может не образоваться, а моделирование даст просто бесконечные сложные осцилляции системы двух протонов и пары электронов).

Теперь мы не будем пренебрегать излучением фотонов, то есть рассмотрим задачу в большей общности. Рассмотрим сначала отдельный атом водорода. Считая протон очень тяжелым и неподвижным, мы можем рассматривать только динамику электрона. В качестве базисных состояний A_j мы тогда можем избрать собственные энергетические состояния электрона и пространственно-временные состояния фотона. Например, процесс излучения фотона электроном, который первоначально находился в состоянии $2s$ будет выглядеть как последовательность состояний вида

$$S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, \quad (22)$$

где каждое совместное состояние S_j атома и фотона имеет вид

$$S_j = \frac{1}{\sqrt{j}}(|\Psi_{2s}\rangle \otimes |\phi_0\rangle) + \sum_{r=1}^j |\Psi_{1s}\rangle \otimes |\psi_r\rangle, \quad (23)$$

$$|\psi_r\rangle = \exp(i\phi_r)\Omega(c r \Delta t) \otimes (|0\rangle + |1\rangle)$$

где $|\phi_0\rangle$ - вакуумное состояние, ϕ_r есть фазовый множитель, $\Omega(R)$ есть характеристическая функция сферического слоя радиуса R , c - скорость света, а последний сомножитель соответствует поляризации. Таким образом, энергия фотона точно определена и время излучения полностью не определено. Однако из представления (23) видно, что вероятность излучения будет стремиться к 1, если время, которое пропорционально j стремится к бесконечности. Действительно, в силу редукции волновой функции мы должны будем выбрать одно из слагаемых в (23) - с равной вероятностью. Одному шагу моделирования движения электронов должно соответствовать много шагов моделирования фотонов, поскольку именно они и создают потенциал, в котором движутся заряженные частицы. То есть, уже при малом числе итераций конечно-разностной схемы для электронов j будет достаточно велико, так что мы можем считать, что излучение произошло и атом находится в состоянии $1s$. Аналогично рассматривается и система двух электронов в поле двух фиксированных протонов, так что у нас получится, что всегда надо рассматривать наиминимальное состояние электронов, если только нет внешнего поля и движением протонов можно пренебречь.

При объединении двух атомов водорода в молекулу мы, таким образом, будем рассматривать в начале состояния $1s$ обоих электронов. Изменение вида иерархии должно происходить примерно так. При сближении протонов электроны теряют жесткую связь со своими протонами и поднимаются в иерархии до уровня 2. После этого их собственное состояние в силу симметризации становится сильно запутанным и их пара может рассматриваться как частица уровня 2, при этом сами электроны становятся частицами уровня 3, что и завершает формирование иерархии стационарного состояния молекулы водорода. Заметим, что такая иерархия очень удобна для вычисления собственных состояний электронной пары: начало координат размещается в середине отрезка, соединяющего протоны. Обращение времени дает обратный процесс: распад молекулы водорода при абсорбции фотона. Наш подход охватывает все виды движения молекулы водорода, которые можно описать в терминах классической динамики, включая ее образование и распад, колебательные и вращательные движения; так можно вычислить линии спектра молекулы, которые соответствуют этим видам движений. Но наш метод охватывает также и те типы движения молекулы, которые нельзя описать в терминах классической динамики. Это движения, связанные с запутанностью между всеми четырьмя частицами. Мы видим, что алгоритмический подход обладает большей общностью по сравнению с аналитическим.

Описание квазичастиц - возбуждений представляет специальную задачу, которая возникает при моделировании системы, подобной кристаллу, состоящей из многих обычных частиц; мы не будем здесь касаться этой задачи.

3.2 Эффекты, вытекающие из алгоритмической процедуры редукции

Определенная нами алгоритмическая процедура редукции волновой функции (далее AR) состоит в обнулении слишком малых амплитуд. Эта процедура принципиально отличается от обычного коллапса волновой функции при измерениях, принятого в квантовой теории тем, что AR дает классическую урновую схему и борновское правило вычисления вероятности, тогда как коллапс этого не дает, и потому борновский постулат вводится в квантовую теорию как аксиома. Можно считать, что борновское правило является главным "эффектом", вытекающим из AR. Однако этот "эффект" не единственный. Процедура AR непосредственно приводит к классическому описанию динамики объекта в случае, если действие соответствующего лагранжиана вдоль рассматриваемых траекторий велико по сравнению с постоянной Планка (без явного использования AR это было отмечено Фейнманом, см. ([FH]), см. также Приложение 1 настоящей работы). Таким образом, AR

автоматически дает переход от квантовой динамики к классической, так что не надо заботиться об этом специально при написании моделирующих программ. Если мы рассмотрим частицу в двух рядом расположенных потенциальных ямах с очень высокой перегородкой, то при алгоритмическом подходе никакого туннелирования происходить не может, потому что его блокирует AR, тогда как в стандартной теории туннелирование имеет место при любой высоте барьера. Этот интересный эффект "блокировки" квантовых свойств должен усиливаться в многочастичном случае при переходе к запутанным состояниям, которые мы трактуем как принадлежность отдельных частиц к одному ярусу в иерархической модели. Действительно, если две частицы не запутаны, каждая описывается своим вектором состояния вида $|\Psi_k\rangle = \sum_{j=0}^N \mu_j^k |\phi_j^k\rangle$, $k = 1, 2$. Если же они запутаны, состояние их - общее и имеет вид $|\Psi_{com}\rangle = \sum_{j,j'=0}^N \lambda_{j,j'} |\phi_j^1\rangle \otimes |\phi_{j'}^2\rangle$. В этом случае при любой фиксации состояния второй частицы j' вектор состояния первой частицы будет определен с разрешением в N раз меньшим, чем при независимых частицах. Это уменьшение разрешения и представляет собой "блокировку" квантовых свойств при запутанности. Например, это может привести к невозможности туннелирования, характерного для независимых частиц, и, как следствие, к стабильности состояний многочастичной системы, определяемого классическим путем, то есть как минимума потенциальной энергии, а не как groundstate. То есть возможны ситуации, когда отдельные части многочастичной квантовой сильно запутанной системы лучше описывать именно классическим образом.

3.3 Некоторые замечания

Сделаем теперь несколько общих замечаний по практической реализации описанной модели на реальных компьютерах, которые обладают еще более жесткими ограничениями на используемые вычислительные ресурсы, чем рассматриваемые нами абстрактные эффективные алгоритмы. Мы видим, что методы конечных разностей применяются здесь только к одночастичным задачам. При этом если мы вычисляем шаг унитарной эволюции для частицы m уровня, то все частицы высших уровней считаются зафиксированными в пространстве, а пространственное положение частиц низших уровней, подчиненных по иерархии, усредняется согласно квантовой статистике. Частицами нулевого уровня можно при молекулярном моделировании считать ядра атомов, электроны и фотоны, частицами первого уровня - атомы, второго и последующих - молекулы и ионы. При этом для большинства целей практического моделирования достаточно, по-видимому, ограничиться тремя уровнями квантовой иерархии. Как уже было сказано, состояние электронов, находящихся на одном ярусе, надо симметризовать согласно методу Фока-Слэтера. Одно предположение мы можем также сделать о почти унитарной эволюции, которое до некоторой степени способно упростить вычисления. Во многих случаях, когда мы можем не слишком заботиться о точности описания состояний фотонов, можно считать, что электроны во время унитарной эволюции либо находятся в стационарных состояниях по энергии, либо мгновенно перемещаются с уровня на уровень, испуская при этом фотон или поглощая его в соответствии с законом сохранения импульса²⁴. Таким образом, электроны могут перемещаться по уровням плавно только в случае, когда происходит поднятие или опускание их уровня в иерархии, или если они рассматриваются как незапутанные частицы. Это предположение фактически означает, что мы будем абстрагироваться от волновых функций фотонов. По-видимому²⁵ такого рассмотрения вполне достаточно для подавляющего большинства молекулярных процессов, даже существенным образом связанных с поглощением-испусканием единичных фотонов.

²⁴Разумеется, при вычислении импульса электрона надо это делать с учетом импульсов всех объемлющих частиц, как это было указано выше.

²⁵Хотя это не является точным фактом.

Вычисления не могут производиться в режиме реального времени показа "фильма"; это было бы невозможно даже при наличии масштабируемого квантового компьютера, который требует время порядка t^2 для моделирования эволюции на отрезке времени t . Поэтому даже для единичной задачи надо использовать банки данных электронных состояний при фиксации ядер, банки данных интенсивностей испускания фотонов разных импульсов при переходе электронов между такими состояниями, а также банки данных для задач простых рассеяний (не более 3 участвующих частиц). Эти банки данных могут быть динамическими, то есть они могут формироваться в ходе моделирования одного фиксированного процесса, а затем уничтожаться. Однако есть банки данных, которые, по-видимому, есть смысл хранить, постепенно уточняя. К этому типу относятся банки данных по устойчивым положениям ядер в молекулах и кристаллах и соответствующих им состояний электронов, участвующих в валентных связях а также зон Бриллюэна, и ядер, находящихся в суперпозиции пространственных состояний (например протоны в водородной связи), а также интенсивности испускания-поглощения фотонов разных импульсов и поляризаций для перехода электронов или ядер между такими состояниями. Такие банки данных можно составить только с учетом влияния малого числа расположенных поблизости заряженных частиц.

Кроме этого, описание большинства движений будет фактически классическим (в особенности это относится к тяжелым объектам типа ядер), а потому электронные состояния часто надо рассматривать только как потенциал, определяющий классическое взаимодействие ядер, как в приближении Борна-Оппенгеймера. Тогда целесообразно составить банки данных по классическим потенциалам, создаваемым такими электронными состояниями (и, может быть, состояниями туннелирующих ядер). Для ядер, входящих в состав стационарных молекул, эти классические потенциалы будут иметь форму упругого потенциала kx^2 , где x - пространственная координата, k - константа, зависящая от моделируемой локальной структуры; так что хранить надо константы k .

4 Заключение

Нами намечены общие идеи алгоритмического подхода к физике, который базируется на фундаментальном понятии эффективного классического алгоритма. Главное предположение этого подхода - возможность моделирования системы любой сложности на классических компьютерах с полиномиальным расходом вычислительных ресурсов. Такой подход не противоречит ничему из того, что в настоящий момент установлено на экспериментах, но он запрещает существование масштабируемого квантового компьютера, который разрешен в традиционной квантовой механике. Мы описали приблизительный вид классического алгоритма, призванного моделировать поведение многочастичных систем, для которых квантовые эффекты играют существенную роль. Этот алгоритм основан на иерархическом представлении квантовых состояний систем из многих частиц, при котором целый ярус частиц одинакового уровня, находящихся в запутанном состоянии, трактуется как одна частица следующего уровня. Для описания унитарной эволюции такой системы используется только одночастичная квантовая динамика; возможны также переходы отдельных частиц между уровнями в данной иерархии, что дает возможность моделировать химические реакции. Эффективность данного алгоритма обеспечивается процедурой редукции, которая уничтожает все состояния в суперпозиции, амплитуда которых по модулю меньше некоторого предельного значения, называемого квантом амплитуды.

Сформулированные нами правила построения модели являются точным выражением квантовомеханического описания динамики системы частиц через тензорное произведение гильбертовых пространств состояний с одним лишь ограничением: мы считаем нулевыми те амплитуды, абсолютные значения которых слишком малы. При этом мы учитываем все эффекты запутанности любого типа между всеми частицами, входящими в моделируемую систему, независимо от того, к какому ярусу они принадлежат. Разделение частиц на ярусы в иерархии имеет только тот смысл, что помогает экономно расходовать вычислительные ресурсы при моделировании при помощи специ-

фических одночастичных приемов.

Мы видели, что наша процедура редукции, то есть отбрасывание состояний с очень малой амплитудой, в принципе достаточна для правильного моделирования декогерентности. Предлагаемый путь моделирования позволяет учесть все элементарные исходы, вероятность которых не меньше, чем $\frac{1}{T}$, где T - имеющееся в нашем распоряжении время для моделирования. Такой подход к декогерентности очень прост в смысле программного моделирования и не требует никакого описания "окружения", за исключением того, что вычислительные ресурсы могут в принципе перераспределяться между разными областями физического пространства. Редукция также непосредственно дает нам сведение квантовой вероятности к классической урновой схеме и борновское правило для ее вычисления, что будет показано также и в Приложении 1. Наконец, редукция делает из квантового описания динамики классическое без всяких дополнительных предположений, что будет показано в Приложении 1.

Таким образом, алгоритмический подход дает универсальное описание квантовой динамики, без ее разделения на унитарную динамику и измерения; такое описание также будет не зависимо от присутствия наблюдателя.

Дальнейший анализ природы кванта амплитуды не является необходимым для построения алгоритма. Тем не менее мы дадим более физичную интерпретацию квантов амплитуд, использующую схему интегралов по траекториям Фейнмана в Приложении 1. В Приложении 2 кратко описан возможный путь представления псевдоевклидовой метрики при алгоритмическом подходе. Подчеркнем, что описанный подход не является интерпретацией квантовой теории. Это скорее начальная часть инструкции по ее практическому применению к сложным системам. Точно также и описываемые в обоих приложениях частные приемы нельзя рассматривать как описание некоего физического механизма; это всего лишь вычислительные приемы, которые не являются единственно возможными. Они касаются двух принципов: вероятностной интерпретации волновой функции и сохранения псевдоевклидовой метрики при переходе от одной инерциальной системы координат к другой. Эти принципы не могут быть математически выведены из более простых или естественных аксиом, но давно и хорошо известны в физике. В приложениях показано, как можно представлять эти принципы при алгоритмическом подходе, не вводя их в модель заранее.

Список литературы

- [VK] К.А.Валиев, А.А.Кокин, Квантовые компьютеры: надежды и реальность, Москва-Ижевск., ГХД, 2000.
- [AB] А.Ахизер, В.Берестецкий, Квантовая электродинамика, М.,ГТТИ, 1953.
- [Aa] S.Aaronson, Multilinear formulas and Scepticism of quantum computing, lanl e-print, Quant-ph/0311039
- [Ak] V.Akulin et al., Non-holonomic control, (to be published in SPIE Proceedings), previous version: lanl e-print Quant-ph/0403227
- [As] A.Aspect, Bell's theorems: the naive view of experimentalist, lanl e-rint Quant-ph/0402001
- [B] Y.Bogdanov, M.Chekhova, S.Kulik, G.Maslennikov, C.Oh, M.Tey, Preparation of arbitrary qutrit state based on biphotons, (to be published in SPIE Proceedings), lanl e-print Quant-ph/0411192
- [Oz] Y.I.Ozhigov, Quantum computers speed up classical with probability zero, Chaos, Solitons and Fractals, 10, 1999, 1707-1714
- [BS] Н.Н.Боголюбов, Д.В.Ширков, Квантовые поля, М.Наука, 1983

- [Be] J.S.Bell, *Phy.Rep.*, 137, 49-54 (1986),
- [Gr] L.Grover, Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack, lanl e-print Quant-ph/9706033
- [Ha] S.Hagan, S.Hameroff, J.Tuszynski, Quantum computations on Brain Microtubules? lanl e-print Quant-ph/0005025
- [Sh] P.Shor, Polynomial time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on quantum computer, *SIAM J.Sci.Statist.Comput.*, 26, 1484, 1997
- [FH] R.P.Feynman, A.R.Hibbs, McGraw-Hill Book company, NY, 1965,
- [Hi] T.Hida, *Brownian motion*, Springer-Verlag, 1980,
- [Me] М.Менский, *Квантовые измерения и декогерентность*, М: Физматлит, 2002
- [LA] J.Labanowski, J.Andzelm (editors) *Density functional Methods in Chemistry*, Springer-Verlag, NY, 1991.
- [Fe] L.Fedichkin, A.Fedorov, V.Privman, Measures of decoherence, *Proc.SPIE*, 5105, 243-254, 2003
- [Pe] R.Penrose et al, *The large, small and the human mind*, Cambridge Univ. Press, 2002
- [NF] В.Намиот, В.Финкельштейн, *Метод псевдокогерентных состояний в нелинейных квантовых системах*, *ЖЭиТФ*, 77, 3(9), 884-898, 1979
- [Sl] J.Slater, *Electronic structure of molecules*, М: Mir, 1965
- [SB] М.Шапиро, П.Брюмер, *Квантовое управление химическими реакциями*, в сб. "Управление молекулярными и квантовыми системами", А.Фрадков, О.Якубовский (ред.), РХД, 2003
- [FTK] H.Fujisaki, Y.Teranishi, A.Kondorskiy, H.Nakamura, Semiclassical approach to controlling chemical reactions, lanl e-print, Quant-ph/0302025
- [Za] C.Zalka, Efficient simulation of quantum systems by quantum computers, lanl e-print, Quant-ph/9603026
- [Wi] S.Wiesner, Simulation of many-body quantum systems by a quantum computer, lanl e-print quant-ph/9603028
- [Oz2] Y.Ozhigov, Simulation of quantum interference by reactions of chemical type, lanl e-print, quant-ph/0310188,
- [Gl] A.Gleason, *J.Math.Mech.* 6, 885, 1957
- [Zu] W.Zurek, *Rev.Mod.Phys.*, 75, 715, 2003 (lanl e-print Quant-ph/0105127)
- [CFS] C.Caves, C.Fuchs, R.Schack, Quantum probabilities as Bayesian probabilities, lanl e-print, Quant-ph/0106133
- [SF] M.Schlosshauer, A.Fine, On Zurek's derivation of the Born rule, lanl e-print, Quant-ph/0312058
- [Mo] U.Mohrhoff, Probabilities from envariance, lanl e-print, Quant-ph/0401180
- [Bu] P.Busch, Quantum states and generalized observables: a simple proof of Gleason's theorem, lanl e-print, Quant-ph/9909073

Приложение 1

Кванты амплитуд в фейнмановских интегралах по траекториям

Приведенный выше набросок возможного устройства модели квантовых эволюций существенно опирается на процедуру редукции, которую следует применять к любому получающемуся состоянию. Именно эта процедура обеспечивает ограниченность числа состояний в суммах, которые участвуют в записи состояний, а следовательно и эффективность нашего алгоритма. Эта процедура может быть принята как естественная при алгоритмическом подходе, и именно она фактически накладывает запрет на создание масштабируемого квантового компьютера; запрет, который отсутствует в традиционной квантовой физике. Мы, тем не менее, покажем, как эта процедура может быть сделана более осмысленной. В действительности нам нужно как-то ограничить минимальный размер амплитуды состояния, входящего в квантовую суперпозицию, то есть ввести кванты амплитуд. Мы укажем здесь путь, который представляется наиболее физичным, и который основывается на фейнмановских интегралах по траекториям. Помимо всего, описание квантовой эволюции с помощью квантов амплитуд очень близко к классическому описанию и потому переход от классического описания к квантовому в рамках такой формы представления унитарной эволюции выглядит очень естественно, тогда как обратный переход основан на редукции.

Кванты амплитуды были введены в работе quant-ph/0310188 с целью дать прямое истолкование квантовой формулы Борна вычисления вероятностей в терминах классической урновой схемы, и эта задача была выполнена с помощью довольно искусственного понятия виртуального состояния. В данной работе мы модифицируем понятие квантов амплитуды с целью получить метод моделирования квантовой эволюции, который имел бы преимущества по сравнению с вычислительными приемами, основанными на методе конечных разностей. В частности, мы потребуем легкости перехода от классического описания частицы к квантовому и обратно, что очень важно, например, для задач молекулярной динамики. Вторым условием будет простая трактовка борновского правила вычисления вероятности как квадрата модуля амплитуды. И наконец, мы требуем, чтобы описание динамики не зависело от присутствия наблюдателя, а декогерентность была бы встроена в модель. Оказывается, что наилучшая стартовая точка для наших целей - это формулировка квантовой механики через фейнмановские интегралы по траекториям (см. ([FH]). В этих терминах амплитуда перехода частицы от точки 1 к точке 2 записывается как интеграл вида

$$K(2;1) = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x]\right) \mathcal{D}x, \quad S = \int_{t_0}^{t_1} L(x'_t, x, t) dt \quad (24)$$

по всевозможным траекториям $x(t)$, ведущим от $1 = (t_1, x_1)$ к $2 = (t_2, x_2)$, где лагранжиан системы $L = E_{kin} - E_{pot}$ есть разность кинетической и потенциальной энергии; например, в случае частицы в скалярном потенциале $E_{kin} = \frac{p^2}{2m}$ для импульса p , $E_{pot} = V(x)$. Функция K называется ядром, или функцией Грина (для волнового уравнения), а S - обычное классическое действие вдоль траектории x .

Интегралы по траекториям удобны для нас тем, что позволяют легко перейти к классическому описанию динамики. Уравнение классической траектории имеет вид $\frac{\delta S}{\delta x} = 0$; то есть действие не меняется при малом изменении траектории. Отсюда мы получаем практическое правило для перехода от классического описания динамики к квантовому. Пусть у нас имеется конечно-разностный метод с шагом Δt для решения уравнений классической динамики. Рассмотрим элемент действия

нашей системы $\Delta S = L\Delta t$, соответствующий данному шагу. Если $\Delta S \gg h$, классическое описание дает правильную картину; если $\Delta S \approx h$, надо переходить к квантовому описанию динамики. Начальное распределение координат при этом можно взять гауссовым, так что волновая функция в начальный момент будет иметь вид: $\Omega(\bar{x}) \exp(i\frac{p}{h}\bar{x})$. И наоборот, при квантовом моделировании переход к классическому должен производиться как только ΔS становится больше постоянной Планка h , поскольку вклады в ядро всех траекторий, далеких от классической, будут деструктивно интерферировать²⁶. В силу принятого нами соглашения производить редукцию над любым получаемым состоянием, это при больших значениях действия приведет просто к тому, что все квантовые траектории, дающие ненулевой вклад, станут классическими. Если мы вычислили по формуле (24) ядро, то волновая функция нашей частицы в момент времени t_2 выражается через волновую функцию ее же в момент t_1 по формуле

$$\Psi(t_2, x_2) = \int K(t_2, x_2; t_1, x_1)\Psi(t_1, x_1)dx_1. \quad (25)$$

Конкретный вид лагранжиана для нас не существенен, мы допускаем и более сложные выражения, например, он может зависеть и от второй производной x по времени, - это потребует только незначительного увеличения внутренней "памяти" квантов амплитуд. В рамках многочастичного гильбертова формализма формулы (24) и (25) справедливы и в многочастичном случае, если под траекторией понимать траекторию движения соответствующей многочастичной системы. Но вернемся к одночастичному случаю. Мы будем считать, что число таких траекторий с самого начала ограничено, и по каждой из них движется определенная фиктивная частица, которую мы и будем называть квантом амплитуды²⁷. Для обеспечения хаотичности распределения точек $x(t)$ на траекториях для разных значений t мы допустим, что наши фиктивные частицы имеют некоторый ненулевой размер и могут сталкиваться друг с другом, меняя при столкновении свои скорости и специальные характеристики²⁸. Поскольку кванты фиктивны, у нас есть еще возможности изменять их массы и режим столкновений, но сначала предположим, что все их массы одинаковы, а столкновения упругие.

Связанные кванты амплитуд

Рассмотрим кванты амплитуд (к.а.) более детально. К.а. представляет собой объект в виде шара, движущийся в трехмерном пространстве. В каждый момент времени (которое предполагается одинаково текущим во всем пространстве) у к.а. α есть динамические характеристики: координаты, скорость, обозначаемые через $x(\alpha)$, $v(\alpha)$, и специальные характеристики, в качестве которых мы в этом параграфе используем амплитуду, обозначаемую через $\lambda(\alpha)$, (вместо амплитуды можно использовать фазу и массу), и будем называть такие кванты связанными. В следующем параграфе мы рассмотрим свободные к.а., у которых специальной характеристикой будет так называемый тип, который может принимать 4 значения.

²⁶Элемент действия зависит от величины Δt , которая не является произвольной. Она не может быть очень большой, ибо тогда мы не получим правильного действия разностного метода. Это накладывает ограничение на сферу действия классической механики. Но Δt нельзя сделать и произвольно малой, так как тогда мы рискуем вообще не закончить вычисления при квантовом описании.

²⁷Это определение позволит моделировать динамику численно, но еще не даст нам "урновой" модели вероятности; чтобы получить такую модель надо дополнительно разбить эти фиктивные частицы на кванты минимального возможного размера (см. ниже).

²⁸Для имитации фейнмановских траекторий совершенно не обязательно использовать столкновения; достаточно просто как-либо хаотически менять траектории, например, при попадании кванта на узел решетки в пространстве. Более того, численное моделирование показывает, что столкновительная модель в большинстве случаев не только не дает ускорения, но и вызывает неоправданную трату вычислительных ресурсов, что ведет к замедлению моделирования. Тем не менее у столкновительной модели, кроме ее очевидной физичности, есть два плюса: во первых, в терминах столкновений можно моделировать квантовую эволюцию (см. ниже), а во вторых, меняя режим столкновений, можно пытаться экономить вычислительные ресурсы в ходе моделирования.

К.а. будем обозначать строчными греческими буквами α, β, γ , динамические характеристики к.а. α обозначаются как $x(\alpha)$, $v(\alpha)$, а набор специальных характеристик - через $\tau(\alpha)$. Сначала мы рассмотрим самую простую версию к.а., когда

$\tau(\alpha) = \lambda(\alpha)$ есть амплитуда, связанная с квантом α . Множество значений для координат x центров квантов амплитуд состоит из узлов решетки с шагом ϵ , который, вообще говоря, зависит от координаты. Пусть координаты реальной частицы измеряются с точностью $\delta = r\epsilon$, r целое²⁹. Тогда одному положению реальной частицы будет соответствовать $(\delta/\epsilon)^3$ положений квантов амплитуд. Все эти положения заполняют куб $C_{l,n,m}^{\delta,\epsilon}$, состоящий из точек вида $l\delta + \epsilon j, m\delta + \epsilon k, n + \epsilon s$, где $j, k, s \in \{0, 1, \dots, r-1\}$. Таким образом, если нам задано положение всех квантов амплитуд во всех допустимых точках, то мы считаем, что амплитуда нахождения реальной частицы в кубе $C_{l,n,m}^{\delta,\epsilon}$ равна

$$\sum_{\alpha: x(\alpha) \in C_{l,n,m}^{\delta,\epsilon}} \lambda(\alpha). \quad (26)$$

Обозначим набор всех к.а. в рассматриваемой области с учетом их координат и скоростей, определяемых с точностью ϵ , а также всех специальных характеристик в момент t через \mathcal{K}_ϵ , где нижний индекс будет часто опускаться. Если теперь зафиксировать значение δ , то мы можем вычислить по этой формуле соответствующее распределение амплитуд, или волновую функцию, которую мы будем обозначать через $|\Psi_{\mathcal{K}_\epsilon, \delta}\rangle$.

Наша задача состоит в том, чтобы определить, как именно преобразуются скорости и амплитуды к.а. при столкновениях, чтобы для всех значений t $|\Psi_{\mathcal{K}(t)_\epsilon, \delta}\rangle$ было бы решением уравнения Шредингера с точностью до $C(M)t\delta^3$ (M есть число всех к.а.), иными словами, чтобы в случае постоянного гамильтониана с этой точностью выполнялось равенство

$$|\Psi_{\mathcal{K}(t)_\epsilon, \delta}\rangle \approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right), \quad (27)$$

а в случае гамильтониана, зависящего от времени то же равенство, но в смысле хронологической экспоненты.

Преобразование характеристик к.а., участвующих в столкновениях, мы оформим в виде реакций вида

$$\bar{v}_1, \bar{x}_1, \lambda_1, \Delta t_1; \bar{v}_2, \bar{x}_2, \lambda_2 \longrightarrow \bar{v}'_1, \bar{x}'_1, \lambda'_1; \bar{v}'_2, \bar{x}'_2, \lambda'_2,$$

где $\Delta t_1, \Delta t_2$ - время, прошедшее со времени предыдущего столкновения первого и второго кванта амплитуды с другими к.а. Ввиду формулы (26) главную роль в определении квантового состояния играют числа $\lambda(\alpha)$, мы в первую очередь определим, каким образом преобразуются эти числа при столкновении к.а. Определение будет таким:

$$\lambda'_j = \lambda_j \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\Delta S_j}, \quad j = 1, 2, \quad (28)$$

где

$$\Delta S_j = L_j \Delta t_j, \quad L_j = E_{kin} - E_{pot} \quad (29)$$

есть лагранжиан j -го кванта амплитуды, вычисленный в точке, лежащей на середине пути со времени предыдущего столкновения. Новые скорости квантов можно определить исходя из того, что соударение считается упругим. Здесь возможны варианты, связанные с тем, насколько конструктивно интерферируют амплитуды λ_j : если они складываются или близки к этому, можно сделать соударение менее упругим и больше похожим на слипание, если же амплитуды интерферируют деструктивно, соударение должно быть ближе к упругому. Просуммируем теперь все числа $\lambda(\alpha)$ для всех к.а. α , которые в момент t находятся в кубе $C_{l,n,m}^{\delta,\epsilon}$. Получившееся значение функции

²⁹ Считать что $\delta = \epsilon$ не удобно, поскольку тогда волновая функция будет иметь сильно разрывный вид.

$|\Psi_{\mathcal{K}(\epsilon, \delta)}\rangle$ будет требуемым приближением настоящей волновой функции рассматриваемой частицы в том случае, если траектории всех квантов амплитуды распределены полностью случайным образом. Действительно, в этом случае вычисление ядра по формуле (24) можно приближенно представить как суммирование чисел $\lambda(\alpha)$ по всем к.а. α , попавшим в куб, соответствующий точке 2, в том случае, если все первоначальные к.а. были расположены в кубе, соответствующем точке 1 и сумма чисел $\lambda(\alpha)$ для к.а. в начальный момент была равна единице. Но тогда наша процедура вычисления $|\Psi_{\mathcal{K}(t_2)\epsilon, \delta}\rangle$ будет приближением формулы (25), то есть даст нам приближенное значение волновой функции частицы в момент t_2 при условии, что $|\Psi_{\mathcal{K}(t_1)\epsilon, \delta}\rangle$ является приближением ее волновой функции в момент t_1 .

Итак, формула (??) является дискретным аналогом фейнмановского интеграла по траекториям (24). Точность этого приближения будет тем выше, чем меньше по модулю числа $\lambda(\alpha)$. Если предположить, что амплитуда зерниста, то есть имеется квант амплитуды g , максимальная возможная точность вычисления тогда будет достигнута при $|\lambda(\alpha)| = g$. Эта ситуация будет рассмотрена в следующем параграфе.

Численные эксперименты говорят о том, что в большинстве случаев столкновительная модель не приводит к экономии вычислительных ресурсов, и даже усложняет дело. Некоторые доводы в ее пользу состоят в следующем. Рассмотрим систему частиц, находящихся в хаотическом движении так что единственным потенциалом для каждой является потенциал столкновений с соседними частицами³⁰. Если длина пробега частиц велика по сравнению с их размерами, и общее их число велико, такую систему можно рассматривать как разновидность марковского процесса, а именно, как модель броуновского движения (см. ([Hi]))³¹. Пусть $u(x, t)$ есть плотность числа частиц в точке x в момент t , тогда эта плотность подчиняется уравнению теплопроводности³²

$$u_t = \frac{1}{2}Cu_{xx}, \quad (30)$$

где C - постоянная, решение которого при $u(x, 0) = \delta(x - x_0)$ имеет вид гауссовой кривой

$$u = \frac{1}{\sqrt{2\pi Ct}} \exp\left(-\frac{x - x_0}{2Ct}\right). \quad (31)$$

С другой стороны, рассмотрим квантовую эволюцию для свободной одномерной частицы, находящейся первоначально в покое и имеющей гауссово распределение амплитуд пропорциональное $\exp(-\frac{\alpha}{2}x^2)$. Если посчитать по формуле (24) ее ядро, то получится (подсчет можно найти в ([FH]):

$$K(x_2, t_2, x_1, t_1) = \left(\frac{2\pi i\hbar(t_2 - t_1)}{m}\right)^{-1/2} \exp\left(\frac{im(x_2 - x_1)^2}{2\hbar(t_2 - t_1)}\right). \quad (32)$$

Подставляя это выражение в формулу (25), и вычислив волновую функцию свободной частицы, мы можем найти плотность вероятности обнаружения этой частицы в точке x в момент t ; она получится пропорциональной

$$\exp\left(-\alpha x^2 \frac{1}{1 + \frac{\alpha^2 \hbar^2 t^2}{m^2}}\right). \quad (33)$$

³⁰ Строго говоря, это еще не броуновское движение. Такое движение получится, если рассматривать столкновения наших квантов с еще более мелкими невидимыми частицами, которые будут делать траектории квантов совершенно хаотическими; для наших целей это не существенно.

³¹ Эту модель пытался исследовать Башелье (ок. 1900), однако впервые уравнение для плотности частиц при броуновском движении получил Эйнштейн (1905); далее подобные процессы исследовали также Винер (1923-38) и Леви (1937-40).

³² Действительно, пусть $\phi(y, t)$ есть доля частиц, переместившихся за время t из x в $x+y$. Мы предполагаем, что она имеет дисперсию, равную Ct , и симметрична. Тогда из определения ϕ мы имеем $u(x, t + t_1) = \int_R u(x - y, t)\phi(t_1, y)dy$ и теперь для получения уравнения теплопроводности достаточно разложить u в ряд по степеням t_1 и применить оба наших предположения.

Сравнивая формулы (33) и (31), мы заключаем, что обе плотности имеют гауссов вид, но плотность броуновских частиц "расплывается" при малых временах быстрее, чем пузырь квантов амплитуд для свободной частицы. Действительно, если в начальный момент времени они были одинаковы, то при малых t коэффициент у показателя степени будет для броуновских частиц иметь вид $1 - At$, а у квантов амплитуд $1 - Bt^2$ при положительных A и B . Казалось бы, это говорит не в пользу броуновской модели для траекторий квантов амплитуд. Однако этот недостаток исправим. Дело в том, что в ходе реакций между квантами амплитуды будет постоянно происходить перераспределение квантов между разными областями моделируемого физического пространства. Если квант амплитуды слишком долго ни с кем не сталкивается, мы договоримся перераспределять его амплитуду между остальными квантами пропорционально их собственным амплитудам³³ (аналогичное действие будет производиться и в случае свободных квантов амплитуд). Это позволяет предотвратить слишком быстрое "растекание" пузыря квантов амплитуд. Подобная процедура все равно необходима нам для описания электромагнитного поля, где фотоны порождаются заряженными частицами. Представим себе, что пузырь амплитудных квантов имеет форму шара, радиус которого меняется со временем: $\{r : |r| < R(t)\}$, причем такое перераспределение и реакции происходят в сферической области на границе шара $\{r : R(t) - \epsilon < |r| < R(t)\}$, где $\epsilon > 0$ достаточно мало, а внутри области $\{r : |r| < R(t) - \epsilon\}$ не происходит даже реакций между квантами амплитуд. Что произойдет с плотностью квантов амплитуды при таком перераспределении? Плотность на рассматриваемой узкой границе будет соответствовать волновой функции частицы. Поскольку эта плотность везде имеет гауссов вид, то она будет совпадать с $|\Phi(t)|^2$ внутри всего пузыря, несмотря на то, что реакции и перераспределение квантов амплитуд происходит только на границе пузыря. Иными словами, столкновительная динамика обеспечивает необходимую плотность квантов амплитуд почти без помощи реакций и перераспределений - они нужны только на границе пузыря. Те же рассуждения годятся и для свободной частицы, имеющей ненулевой средний импульс. Эти качественные соображения показывают, что столкновительная динамика является в принципе хорошей моделью фейнмановских траекторий, по крайней мере, в случае свободной частицы, так как сама по себе поддерживает правильный вид плотности квантов амплитуд, что, по видимому, должно давать некоторую экономию вычислительных ресурсов по сравнению с прямым перебором траекторий, скажем, по методу Монте-Карло. Эти рассуждения, конечно, очень приблизительные, так как мы здесь учитывали только "количественную" плотность квантов амплитуды, а не то приближение волновой функции, которое из них получается по формуле (??). Однако в случае свободных квантов амплитуд их "количественная" плотность уже будет соответствовать приближению волновой функции, что делает наши рассуждения о столкновениях более осмысленными. Отметим, что в квантово амплитудной модели все амплитудные части λ_α квантов амплитуды α можно считать совпадающими по модулю, и тогда все различие между ними заключено в фазах, которые и дают при сложении интерференционную картину.

Моделирование с квантами амплитуд

Квантово амплитудная модель состоит из динамики квантов амплитуд, их перераспределения и вычисления волновой функции. Опишем эти части последовательно.

Сделаем сначала очень существенное для дальнейшего изложения замечание. Мы уже условились разделять в нашей модели две части: доступную пользователям, и доступную только администратору. Например, время пользователя (физическое время) мы будем обозначать через t , а время моделирования (время администратора, или компьютерное время) - через τ . Это можно понимать так, что пользователь смотрит "фильм", который ему показывает администратор, и при этом показе время течет в соответствии со шкалой t . Но съемка этого "фильма" занимает другое время; и именно это время, имеющее смысл только для администратора, и равное числу шагов моделирующего

³³ Можно уничтожить такой квант и породить новый с той же скоростью с координатами, соответствующими распределению амплитуд.

алгоритма, мы обозначаем через τ . "Фильм" этот является интерактивным, то есть пользователь может вмешаться в процесс, и тогда шкала времени τ окажется разорванной, так что моделирование надо будет частично начинать сначала. Доступная пользователю часть модели должна соответствовать реальному наблюдаемому миру, и в данном параграфе мы будем вести речь в основном о ней. Главным понятием в этой части модели является пространство. Пространство должно в соответствии с этим представляться в виде трехмерной решетки с некоторым очень маленьким шагом Δx , одинаковым во всех трех направлениях; так что мы будем считать допустимыми только те положения рассматриваемых частиц, которые совпадают с узлами этой решетки. Движение точечной частицы тогда представляется в виде последовательности скачков из одного узла в соседний - мы не допускаем перескоков через несколько узлов, поскольку это не дает возможности пользователю детектировать частицу в промежуточном положении³⁴ Но тогда мы получаем, что время моделирования $\Delta\tau$ будет пропорционально тому расстоянию, которое преодолет частица за промежуток физического времени Δt . То есть, один и тот же промежуток физического времени Δt требует разных затрат компьютерного времени $\Delta\tau$, которое будет пропорциональным скорости частицы. Представим себе, что пространство потенциально бесконечно: мы можем при необходимости всегда присоединить к нашей решетке новые узлы. Тогда для моделирования частицы, движущейся со скоростью v в течение фиксированного промежутка времени t потребуется время моделирования τ , пропорциональное v . Это означает, что мы не сможем моделировать сколь угодно большие скорости. Доступные для моделирования физические скорости должны быть ограничены величиной, которая пропорциональна максимально возможному времени ожидания "фильма" τ_{max} (и, конечно, пропорциональна тактовой частоте моделирующего процессора).

Координатное и импульсное представление волновой функции в терминах квантов амплитуд

Рассмотрим переход к импульсному представлению волновой функции в терминах квантов амплитуд. Пусть у нас имеется резервуар с набором \mathcal{K} квантов амплитуд, так что соответствующая волновая функция частицы $|\Psi_{\mathcal{K},\epsilon,\delta}\rangle$ вычисляется по формуле (??). Мы предполагаем, что

- Значение ϵ настолько мало, что есть много малых кубов размера ϵ , которые составляют связанный массив и для которых значения волновой функции, вычисленные по формуле (??), близки.
- В силу хаотичности столкновений в выбранной нами модели можно считать, что импульсы квантов амплитуд распределены примерно по одинаковому нормальному закону внутри каждого малого кубика.

Выберем произвольное значение импульса частицы: k_0 , и покажем, как вычислять значение волновой функции данного состояния $|\Psi_{\mathcal{K},\epsilon,\delta}\rangle$ в импульсном представлении. Стандартный путь состоит в применении преобразования Фурье:

$$\Psi(k)\rangle = A \int_R \Psi(r) e^{-irk} dr. \quad (34)$$

Поскольку каждый квант амплитуды обладает помимо координаты еще и скоростью, то есть импульсом, мы можем ввести новые амплитуды μ , полученные сдвигом фазы из амплитудных частей квантов:

$$\mu_\alpha = \lambda_\alpha e^{-ir_\alpha k_\alpha}. \quad (35)$$

³⁴ Есть и еще один довод против таких перескоков. Если скорость велика а траектория частицы проходит вблизи точки, где потенциал обращается в бесконечность, то в случае перескоков мы бы получили, что движение частицы существенно зависит не только от ее начального положения, но и от начального момента времени, что, конечно, совершенно неприемлемо.

Подставляя в (41) выражение для волновой функции из (??) и используя (35), мы получаем

$$\Psi(k_0) = A \sum_{\alpha} \mu_{\alpha} e^{ir_{\alpha}(k_{\alpha} - k_0)}. \quad (36)$$

В силу наших предположений о распределении импульсов квантов амплитуд, мы получаем, что в данной сумме все слагаемые, соответствующие таким α , что $|k_{\alpha} - k_0| > \epsilon$, при достаточно малом ϵ , дают пренебрежимо малую величину, и мы можем написать приближенное равенство

$$\Psi(k_0) \approx \sum_{\alpha: |k_{\alpha} - k_0| < \epsilon} \mu_{\alpha}. \quad (37)$$

Это означает, что от набора \mathcal{K} квантов амплитуд одинаково легко переходить как к координатному представлению волновой функции - по формуле (??), так и к импульсному - по формуле (37); в обоих случаях это простое суммирование квантов амплитуд нужного нам типа. Единственное действие, которое надо совершить для перехода к импульсному представлению - сдвиг фазы амплитуд (35) (для симметрии мы могли бы включить в тип квантов половинный сдвиг - тогда сложность вычисления координатной и импульсной волновой функции была бы в точности одинакова).

Квантово-амплитудное представление многочастичной системы

Переход к системе многих частиц в квантово-амплитудном представлении осуществляется естественным образом. Пусть S_1, \dots, S_k - отдельные частицы в одном ярусе (как правило, $k = 2$). Мы будем считать, что некоторые наборы вида

$$\alpha_1, \dots, \alpha_k \quad (38)$$

к.а. этих частиц образуют объект, называемый квантом амплитуды для всей системы. После этого траектория для такого объекта определяется естественным образом; столкновения определяется как попадание этого сложного кванта в некую область общего пространства конфигураций и т.д. Замечание о плотности точек деления пространства конфигураций для одной частицы справедливо и здесь.

Для таких сложных квантов амплитуды правило преобразования амплитудных частей снова определяется согласно (28), где действие вдоль заданной траектории движения такого кванта амплитуды определяется как обычно, с учетом кинетической энергии всех составных частей этого сложного кванта и его потенциальной энергии. Это при большом числе квантов амплитуды дает нам модель унитарной динамики, соответствующей уравнению Шредингера для системы многих частиц.

Рассмотрим, как в терминах квантов амплитуды получается борновское правило вычисления квантовой вероятности как квадрат модуля амплитуды. Пусть, например, мы измеряем пространственное положение единичного электрона. Это означает, что происходит контакт этого электрона с многочастичной системой, так что при этом образуются сложные кванты амплитуды вида (38). Пусть, для определенности, a_1 обозначает к.а. электрона, а остальные элементы этого кортежа обозначают к.а. частиц, входящих в измерительное устройство (включая фотоны), так что среди этих частиц есть те, что будут нам указывать на измеряемое пространственное положение электрона - пусть это a_2, \dots, a_s , $s < k$. Мы, как обычно, предполагаем, что амплитудные части всех сложных к.а. по абсолютной величине совпадают, и примерно равны величине кванта амплитуды, то есть наименьшему значению амплитуды, что гораздо меньше амплитуд к.а. отдельного электрона. Теперь собственной эволюцией электрона можно пренебречь, поскольку измерение его координаты предполагает очень сильное взаимодействие его с измерительным устройством, то есть мы должны моделировать совместную эволюцию сложной системы электрон + измеритель. Пусть нас интересует попадание электрона в некоторый объем ΔV с координатой x . Среди сложных к.а. имеются

те, для которых положение электронного кванта a_1 попадает в ΔV . Их число l , конечно, не связано ни с какой амплитудой, поскольку a_{s+1}, \dots, a_k принимают произвольные положения. Но так как сложных квантов амплитуды очень много и их амплитуды по модулю одинаковы и близки к минимально возможной, их общее число l должно быть пропорционально $|\Psi(x)|^2$, так как моделируемая эволюция является унитарной³⁵. А это просто означает, что если мы наугад выберем сложный квант амплитуды системы электрон + измеритель, то вероятность получить значение измерителя, соответствующего данному положению электрона, будет пропорциональна $|\Psi(x)|^2$, с коэффициентом, не зависящим от x . Это и есть классическая урновая схема, дающая борновское правило вычисления вероятностей в квантовой механике.

В квантово-амплитудном подходе довольно трудно представлять измерение состояний многочастичной системы так, как это определяется в гильбертовом формализме, то есть в виде проекции на соответствующее подпространство³⁶. Легко дать описание измерению одной частицы в ансамбле; это описание совпадает с тем, что описано выше. Такое измерение одной частицы дает знание о всем ансамбле в том случае, когда частицы в нем сильно взаимодействуют. Например, если мы рассмотрим измерение положение ядра атома, то при этом исчезают кванты амплитуд ядра, расположенные далеко от первого столкновения однотипных квантов амплитуд при измерении. Это приводит к быстрому исчезновению квантов амплитуд электронов, находящихся вблизи исчезнувших квантов амплитуд ядер, то есть таким образом можно получать эффект, сходный с измерением состояния вида $|00\dots\rangle + \lambda_1|11\dots1\rangle + \lambda_2|22\dots2\rangle + \dots$. Можно также надеяться и на описание измерений ЭПР пар, которые демонстрируют нарушение неравенств Белла, а именно - быстрое изменение базиса измерения одной частицы, при котором свет не успеет дойти до второй. Для этого надо использовать кванты амплитуд, соответствующие разным базисам измерений; но в любом случае надо применять сигналы, распространяющиеся в среде моделируемой системы, не ведущие к информационному обмену между пользователями. При любом подходе к моделированию квантовых систем использование таких сигналов неизбежно в силу квантовой нелокальности.

Интересный вопрос: как выбирать компоненты сложных квантов амплитуд вида (38) из одночастичных к.а. ? При формировании многочастичной системы в случае контакта одночастичных пузырей мы можем считать, что такие сложные кванты образуются при последовательных столкновениях одночастичных к.а., информация о которых запоминается. Для уточнения режима образования и распада многочастичных квантов амплитуд можно также применять генетические алгоритмы.

Непрерывное измерение как нормировочные системные сигналы

Единственная нелокальная процедура в квантово амплитудном формализме - уничтожение и рождение квантов амплитуды, которая вводится для сохранения их общего числа. Эта процедура родственна процедуре нормировки волновой функции, и для ее обеспечения необходимы сигналы, которые распространяются быстрее, чем движутся кванты амплитуд³⁷; эти сигналы мы назовем нормировочными. Нормировочные сигналы не могут переносить никакой информации, задуманной пользователем А, к пользователю В. Однако наличие таких сигналов в системе необходимо для объяснения квантовой нелокальности, установленной в ряде экспериментов³⁸. В терминах "фильмов" нормировочные сигналы означают просто, что такой "фильм" готовится заранее и демонстрируется пользователю по мере готовности его отдельных частей. При этом пользователь не может переделать уже готовые части такого "фильма", но может заказывать на будущее очередные его части. Такая предварительная подготовка как раз и дает возможность моделирования квантовой

³⁵Необходимо помнить, что это достигается после многочисленных перераспределений квантов амплитуд при многошаговом моделировании унитарной эволюции.

³⁶Заметим, что и реализовать на опыте такое абстрактное измерение не менее трудно.

³⁷Можно было бы сказать: распространяются в другой среде, доступной только администратору системы, и недоступной пользователям.

³⁸См., например, ([As],[B]).

нелокальности с помощью классической вычислительной сети, которую мы и назвали административной системой. Если бы пользователь имел право посмотреть "внутри" нее, он бы увидел невозможную вещь, то есть сигналы, перемещающиеся мгновенно. Отсутствие у пользователя таких прав как раз и означает ограничение на скорость передачи информации. Это ограничение прав доступа можно сформулировать, как и выше, в терминах "свободы воли". Оно имеет фундаментальную природу и связано с предотвращением логических парадоксов.

Одна из целей введения квантов амплитуд состояла в том, чтобы получить первопринципное описание декогерентности текущего квантового состояния в ходе его эволюции, чего нельзя достичь в рамках гильбертова формализма. Химический метод к.а. позволяет сделать это очень естественно. Пузырь, наполненный свободными квантами амплитуд, является нашей основной моделью квантового состояния для одночастичной системы. Для описания его динамики надо знать, что происходит с отдельными квантами амплитуд. Наши рассуждения здесь не зависят от того, какую форму квантов амплитуды мы рассматриваем: свободную или связанную. У нас имеется источник квантов - их столкновения, так что все что надо описать, это процедуру уничтожения квантов амплитуд, которая необходима для сохранения их общего числа. Мы договоримся уничтожать любой квант амплитуды, который на протяжении достаточно длительного времени $t > t_0$ не участвовал в столкновениях, и, кроме того, уничтожать оба кванта амплитуды если они взаимно противоположны: x^s и x^{-s} , $x \in \{\alpha, \beta\}$ (r -редукция). Этот метод подходит для одной частицы, движущейся в пустом пространстве; но уже для частицы в потенциальном рельефе этот способ может привести к слишком быстрому падению числа квантов амплитуд из-за их "растеканию" по поверхности большого размера. Для предотвращения этого нежелательного процесса мы введем повторное использование квантов амплитуд, что эквивалентно нормировке волновой функции: исчезающие кванты амплитуд будут перераспределяться на другие пространственные положения в соответствии с распределением амплитуд, посчитанном по формуле (??). Уничтожаемый квант амплитуды должен превращаться в копию этого кванта, причем с таким же импульсом. При работе со свободными квантами можно еще обеспечить детерминистичность каким-либо несложным приемом, чего нам делать совершенно не обязательно. Эта процедура родственна нормировке текущего квантового состояния, которое постоянно подвергается мягким измерениям³⁹.

Выше уже отмечалось, что вводить специальную процедуру измерения в алгоритмическое описание квантовой динамики не нужно. Но для ускорения подготовки "фильма" такой прием может использоваться. Измерение тогда наступает в момент распада пузыря на несвязные компоненты⁴⁰. В этом случае в качестве нового пузыря выбирается та компонента связности, в которой первым произошло столкновение двух однотипных квантов амплитуд; все прочие кванты распределяются по новому пузырю согласно описанной выше процедуре⁴¹.

Для реализации непрерывного измерения необходимы нормировочные сигналы с мгновенным доступом ко всем квантам амплитуды данной частицы. Эти сигналы не имеют никакого физического смысла по отношению к пользователю, поскольку с их помощью нельзя передавать задуманной пользователем информации. В отличие от квантов амплитуд, которые по существу являются копиями одной и той же частицы, и скорость которых не может превосходить скорость света, сигналы распространяются мгновенно. Это даст нам не только принципиальную возможность описывать взаимодействие частиц в поле, но и поведение самого поля, например, эксперименты по детектиро-

³⁹ Если динамика квантов амплитуд приводит к тому, что в некоторой области их просто нет, то с точки зрения гильбертова формализма это эквивалентно мягкому измерению волновой функции (- ср. ([Me]))

⁴⁰ Распознавание этого момента может быть основано на постоянно идущей передаче значения специального регистра связности от одного кванта к другому при столкновениях; это значение периодически меняется, так что компонента связности пузыря будет характеризоваться одинаковым значением регистра связности. В частности, связность означает наличие одинакового значения регистра связности у всех квантов амплитуды, относящихся к данной частице.

⁴¹ Возможен несколько иной подход, когда та часть \mathcal{B}_1 пузыря, которая обладает большей поверхностью, быстрее теряет кванты амплитуд в результате вылета наружу, так что эти кванты вновь возникают в другой области \mathcal{B}_2 , что приводит к исчезновению \mathcal{B}_1 ; или сочетание таких приемов.

ванию ЭПР- пар (см. ([As]), которые без такого предположения нельзя было бы визуализировать. Сигналы являются внутренними процессами моделирующей системы и не могут сами по себе переносить никакой задуманной пользователем информации, так что никаких нарушений фундаментального релятивистского ограничения на скорость передачи информации не возникнет. Это можно объяснить и иначе. То, что называется "свободой воли" присутствует только среди пользователей, в мире квантов амплитуд и воздействующих на них сигналов ее нет, поскольку все, в том числе и исходы всех наблюдений детерминированы. Поэтому сигналы, определяющие форму пузыря в принципе могут в нашей модели перемещаться с любой скоростью не нарушая релятивистского запрета на сверхсветовое перемещение информации - без "свободы воли" нет и информации. Пользователи могут получать информацию о квантах амплитуд только через измерения, связанные со столкновениями квантов амплитуд так, как это было описано выше. Такой способ информационного обмена между пользователями нашей воображаемой системы является санкционированным, и не позволяет передавать информацию быстрее, чем движется сам квант амплитуды⁴². Такой подход мы будем применять и для фотонов, учитывая отмеченные выше особенности электромагнитного поля. Отметим, что описание самого релятивизма в терминах квантов амплитуды является отдельной задачей, которая выходит за рамки настоящей работы.

Подытоживая, можно сказать, что моделирующий процесс для многочастичной системы состоит из двух типов превращений квантов амплитуд:

- локальных химических реакций,
- нелокальных "нормировочных" сигналов.

Свободные кванты амплитуд

Моделирование на базе связанных квантов амплитуд основано на алгебраических операциях над бинарными записями самих амплитуд, что не дает нам классической урновой модели для квантовой вероятности. В этом параграфе мы покажем, как получить такую модель, если разбить связанные кванты на малые слагаемые, которые мы и назовем свободными квантами амплитуд. В терминах свободных к.а. можно дать классическую интерпретацию квантовой вероятности, вообще не используя алгебраических операций, а основываясь только на реакциях химического типа между к.а. Свободные кванты являются точным выражением зернистости амплитуд, тогда как связанные кванты полностью выражают только зернистость пространства. Использование свободных квантов дает надежду получить при моделировании многочастичных систем такие коллективные эффекты, которые нельзя получить, если считать амплитуды непрерывными. Свободные к.а. более соответствуют идеологии аналогового а не цифрового моделирования, поэтому практическое вычисление, по видимому, удобнее производить на основе связанных квантов амплитуд. Свободные кванты амплитуд позволяют свести к реакциям химического типа все описание квантовой динамики; поэтому мы посвятим один параграф их изучению.

Для данного к.а. q мы обозначаем его тип через $\tau(q)$. Всякий тип имеет вид

$$x_r^s, \tag{39}$$

где $x \in \{\alpha, \beta\}$ определяет, какую часть амплитуды этот квант представляет: вещественную (α) или мнимую (β), $s \in \{+, -\}$ определяет знак этого кванта, и r есть список вида $r = j \ r_1 \ \dots \ r_k$. Здесь первый элемент $j = 0, 1, \dots, N - 1$ определяет базисное состояние $|\Psi_j\rangle$ которому соответствует

⁴²Но если представить себе, что пользователь каким-то образом узнал системную информацию о точном положении всех квантов амплитуд и обладал бы при этом мгновенно действующим компьютером, то он, конечно, смог бы передавать свои сообщения сколь угодно быстро.

данная амплитуда и которое меняется соответственно координате данного кванта (см. ниже), а остальные элементы содержат вспомогательные опции кванта. Мы принимаем обычные правила для обращения со знаками. Обозначим через $[x_j^s]_{\mathcal{B}}$ общее число к.а. вида (39) в пузыре \mathcal{B} , где в нижнем индексе вспомогательные опции и \mathcal{B} будут часто опускаться. Положим $[x_j] = [x_j^+] - [x_j^-]$.

Результат всевозможных аннигиляций к.а. типов x_r, x_r^{-1} называется r -редукцией. Определим вещественные неотрицательные числа

$$p_j = \frac{[\alpha_j]^2 + [\beta_j]^2}{\sum_{x \in A, 0 \leq k \leq N-1} [x_k]^2}. \quad (40)$$

Такое число p_j можно рассматривать как вероятность получения реального состояния типа (x_j^s, x_j^s) для каких-либо $x \in A, s \in \{+, -\}$ как результат всех последовательных j -редукций в пузыре ($j = 0, 1, \dots, N-1$), если под реальным состоянием понимать результат столкновения квантов амплитуды одного типа⁴³.

Для данного состояния

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j |\Psi_j\rangle \quad (41)$$

рассматриваемой системы мы обозначим $\operatorname{Re} \lambda_j, \operatorname{Im} \lambda_j$ через $\alpha_{j,\Psi}, \beta_{j,\Psi}$ где нижний индекс Ψ будет часто опускаться. Мы представляем нормированное состояние (41) некоторым пузырем \mathcal{B} .

Состояние (41) называется соответствующим пузырью \mathcal{B} тогда и только тогда, когда для всех $j, k = 0, 1, \dots, N-1$ и $x, y \in A$ справедливы следующие равенства

$$\frac{[x_j]_{\mathcal{B}}}{[y_k]_{\mathcal{B}}} = \frac{x_{j,\Psi}}{y_{k,\Psi}}.$$

В этом случае мы пишем $|\Psi\rangle = |\Psi\rangle_{\mathcal{B}}$. Применяя обычные правила для вычисления вероятностей, мы заключаем, что если $\Psi = \Psi_{\mathcal{B}}$, то для всех $j = 0, 1, \dots, N-1$ $p_j = |\lambda_j|^2$ что служит обоснованием вероятностной интерпретации квадрата модуля амплитуды.

Фазовый сдвиг вида $\Psi \rightarrow e^{i\phi}\Psi$ представляется списком реакций между сталкивающимися квантами амплитуд вида⁴⁴

$$\begin{aligned} \beta^s &\rightarrow \beta^s, \alpha^{-s}, \\ \alpha^s &\rightarrow \alpha^s, \beta^s, \end{aligned} \quad (42)$$

где $s \in \{+, -\}$, а ϕ выражает интенсивность реакций и зависит от плотности квантов амплитуды и их объема. Чтобы ϕ не зависело от плотности квантов амплитуды можно варьировать объем $v(\alpha)$ каждого кванта α , так, чтобы $v(\alpha) = v_\alpha^0 \delta t$, где δt - отрезок времени, прошедший со времени предыдущего столкновения данного кванта с другим квантом той же частицы; таким образом ϕ будет определяться только значением v_0 . Мы можем принять для объема также и отрицательные значения, которые можно хранить со знаком в памяти компьютера. При этом амплитуды кванта отрицательного объема считается так же, как и обычно, но только берется со знаком минус (это также эквивалентно тому, что в (42) мы берем $-s$ всюду вместо s в правой части реакций). Тогда в случае свободных квантов амплитуды нам надо будет только подобрать v_α^0 для кванта α так,

⁴³Эта интерпретация борновского правила, конечно, гораздо хуже той, которую мы дали выше, потому что она требует "спаривания" к.а. одного типа, то есть содержит некую искусственную конструкцию; эта конструкция, тем не менее, вполне соответствует духу реакций химического типа между к.а.

⁴⁴Тип второго кванта амплитуды при столкновении не играет никакой роли, и мы поэтому его опускаем. Столкновение считается происшедшим, если центр второго кванта вошел в объем, занимаемый тем квантом, для которого выписаны реакции.

чтобы это число было бы пропорционально элементу δS действия для кванта α , которое вычисляется по формуле (29). Теперь вся квантовая эволюция моделируется реакциями вида (42)⁴⁵. Число квантов амплитуд в реакциях всегда растет, что компенсируется их убылью при удалении на большие расстояния, так как мы договорились ликвидировать всякий квант, который не испытывал столкновения с другими в течение достаточно длительного времени.

Другой подход состоит в том, чтобы кванты были точечными объектами, а их столкновения заключались в том, что они оказываются в малых и одинаковых сегментах пространства конфигураций друг около друга. Если мы устремим размер этих областей к нулю, а число квантов амплитуд - к бесконечности, у нас получится эволюция волновой функции в соответствии с уравнением Шредингера. Если мы решаем его методом конечных разностей, то изменение плотности точек деления пространства конфигураций для одной частицы в соответствии с правилом $\rho(x) = C |\Psi(x)|^2$ будет просто выражением наиболее правильного расходования вычислительных ресурсов при таком методе.

Мы видим, что свободные кванты амплитуд не только сводят квантовую вероятность к классической урновой схеме, но и сводят все управление эволюцией для сколь угодно сложного гамильтониана к варьированию размеров квантов амплитуд (именно размеры квантов амплитуд зависят от потенциала), тогда как реакции всегда постоянны и имеют вид (42). Недостаток метода свободных квантов амплитуды в том, что здесь мы работаем с числами явно, не прибегая даже к их арифметической записи, что, вообще говоря, приводит к экспоненциальному росту вычислительного ресурса по сравнению с методом связанных квантов амплитуд⁴⁶. Итак, связанные кванты амплитуд являются алгебраической формой для представления свободных квантов, и в дальнейшем мы будем использовать именно связанную форму как наиболее удобную для записи.

Взаимодействие частицы с гармоническим осциллятором

Рассмотрим в качестве примера "квантово-амплитудного" подхода к многочастичным задачам стандартную задачу о гармоническом осцилляторе, взаимодействующем с частицей. Эта задача важна тем, что она является моделью взаимодействия заряженной частицы и электромагнитного поля. Лагранжиан системы частица + осциллятор имеет вид (см. ([FH]):

$$L = \frac{mx'^2}{2} - V(x, t) + \frac{MX'^2}{2} + \omega^2 X^2 + g(x', x, t)X(t), \quad (43)$$

где x и X - координаты частицы и осциллятора, V - потенциальная энергия частицы. Применим к этой задаче квантово-амплитудный подход. Здесь возникает один важный вопрос, ответ на который необходимо дать до рассмотрения электродинамики. Как согласовать координаты частицы и осциллятора при столкновении их квантов амплитуд, учитывая, что x и X должны быть координатами и соответствующих квантов амплитуд, причем при столкновениях мы не можем потребовать их совпадения? Самое простое решение состоит в следующем. Квант амплитуды осциллятора всегда имеет координату вида $X_0 + X$, где X_0 определяет только его условное положение в моделирующем пространстве и моменты столкновения с другими квантами амплитуд и никак не участвует в реакциях, а X как раз берется из лагранжиана и участвует в реакциях; причем $|\Delta X_0| \gg |X|$ в любой момент времени (размах маятника пренебрежимо мал по сравнению с перемещениями кванта амплитуды). Соответственно, шаг моделирования квантов амплитуд частицы $Dt \gg \delta t$ намного превосходит такой же шаг для осциллятора.

⁴⁵Для того, чтобы сделать модель еще более симметричной и не выделять явно действительную и мнимую части амплитуд, можно еще завести эти кванты типов α и β в различных базисах алгебры комплексных чисел вида $e^{i\phi_j}, e^{i(\phi+\frac{\pi}{2})}$ для $\phi_j = 2j\pi/N, j = 0, 1, \dots, N-1$.

⁴⁶Метод свободных квантов можно было бы использовать, если точность вычисления амплитуд не очень важна по сравнению с определением тех базисных состояний, для которых она вообще отлична от нуля, иными словами, когда состояние в любой момент имеет вид $\sum_{j \in J} \lambda_j |\Psi_j\rangle$, где число возможных состояний J ограничено независимо от момента времени.

Рассмотрим сначала моделирование в рамках урезанного формализма с аксиомой А2.

Преобразование амплитудной части j -го кванта α амплитуды осциллятора, в момент его столкновения в момент t' с себе подобным квантом будет выглядеть так:

$$\lambda_j^{osc} = \lambda_j^{osc} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \delta S_j^{osc}}, \quad \delta S_j^{osc} = \left[\frac{M(X(t') - X(t_0))}{2(t' - t_0)} + \omega^2 X(t')^2 + g \left(\frac{x_j(t') - x_j(t_1)}{t' - t_1}, x_j(t'), t' \right) X_j(t') \right] dt, \quad (44)$$

где t_0 есть момент предыдущего столкновения кванта α с себе подобным, x_j есть координата спаренного с α квантом β амплитуды частицы, t_1 - момент последнего столкновения β с себе подобным квантом.

Преобразование амплитудной части кванта амплитуды частицы будет выглядеть совершенно аналогично

Теперь посмотрим, как моделирование будет выглядеть в "химическом" формализме. Здесь реакции при столкновениях однотипных квантов амплитуд: частица-частица или осциллятор-осциллятор будут такими же, как и выше. Но для введения взаимодействия частица - осциллятор нам нужно предположение о динамике перемещения самого осциллятора в пространстве координат частицы, то есть закон изменения X_0 . Это серьезный вопрос, имеющий физический смысл, и возникающий также и в формализме А2, так как там было неясно, по какому закону движутся кванты амплитуд перед "спариванием". Это говорит о том, что данная задача нуждается в дополнительных условиях, касающихся движения осциллятора. Кванты амплитуд осциллятора таким образом нельзя рассматривать так, как мы рассматривали частицы в потенциале - его следует рассматривать как частицу - переносчик поля. Именно это и имеется в виду при рассмотрении этой задачи в квантовой физике: осциллятор трактуется как одна мода колебаний электромагнитного поля. Тогда мы должны предположить, что кванты амплитуд осциллятора испускаются заряженными частицами (см. ниже). Пусть пока нам задан закон движения квантов амплитуд осциллятора по координате X_0 . Взаимодействие квантов амплитуды частицы и осциллятора появляется только при их столкновении. Если квант амплитуды α осциллятора сталкивается с квантом β амплитуды частицы, можно считать, что реакция происходит в соответствие с формулой (44), и аналогично выглядит реакция для амплитудной части β . Поскольку слагаемое взаимодействия $g \left(\frac{x_j(t') - x_j(t_1)}{t' - t_1}, x_j(t'), t' \right) X_j(t')$ войдет дважды, можно было бы поставить перед ним коэффициент $1/2$ - его можно добавить к уже существующему коэффициенту g . Это даст алгоритмическое урезание гильбертова формализма только после того, как мы образуем сложные кванты амплитуд по изложенному выше рецепту.

Если осцилляторов несколько и они не взаимодействуют, то преобразования амплитудных частей квантов амплитуд выписывается аналогично с учетом разных частот ω ; случай же взаимодействующих осцилляторов можно привести к невзаимодействующим заменой системы координат (см. ([FH])), или написать для взаимодействия осцилляторов преобразования по аналогии с (44).

Заметим, что для организации столкновений квантов амплитуд осциллятора и частицы необходимо специальное предположение о движении квантов осциллятора, то есть о том, как меняется X_0 . Здесь мы считаем, что кванты амплитуд движутся хаотически, то есть изменение X_0 обеспечивает достаточное для достижения точности число столкновений.

Несколько заряженных тел в электромагнитном поле

В рассмотренной нами в предыдущем параграфе задача многих тел предполагалось, что эти тела имеют массу. Такое рассмотрение можно применить и к случаю скалярного кулоновского поля. Однако если мы попытаемся включить в лагранжиан отдельные фотоны, то у нас будут определенные трудности, поскольку фотоны не рассеиваются полем, а сами его переносят, - это уже требует к ним совершенно особенного подхода, отражающего главный закон электродинамики - уравнения Максвелла. Квантово-амплитудный подход, в принципе должен обладать необходимой гибкостью,

для того чтобы мы могли распространить его и на фотоны. В этом параграфе мы и собираемся наметить основные черты нашего подхода к электромагнитному полю, опираясь на уже рассмотренную нами задачу о взаимодействии частицы с гармоническим осциллятором. Мы будем заниматься системой заряженных частиц с учетом динамики поля. Случай нескольких частиц получается из случая одной частицы с помощью образования сложных к.а. для нескольких частиц и добавления перестановок тождественных частиц так же, как это было описано выше. Поэтому вся специфика электродинамического рассмотрения проявляется уже для системы одна частица + поле. Такой случай представляют в виде частицы, взаимодействующей с системой гармонических осцилляторов, которая и служит изображением поля. Этот переход сопровождается одним специфическим соглашением, вытекающим из уравнений Максвелла, и которое мы обязаны принять, поскольку это соглашение о том, как величина векторного потенциала поля получается путем сложения координат гармонических осцилляторов. Так как квантами электромагнитного поля являются фотоны, то мы должны применить к фотонным амплитудным квантам нашу столкновительную модель, дающую классическое объяснение квантовой вероятности. Однако фотоны надо рассматривать с учетом их специфики, в виде системы гармонических осцилляторов, взаимодействующих с частицей, тем более что разложение поля на фотоны реализуется не в координатном, а в импульсном пространстве. Следуя нашим правилам из предыдущего параграфа, мы считаем, что фотонные кванты амплитуд перемещаются так быстро, что в окрестности данной фиксированной точки за время Δt сдвига адрона на один шаг успевает побывать достаточное их число, чтобы мы могли их просуммировать и применить разложение поля на фотоны. Рассмотрим систему электрических зарядов с плотностью ρ в электрическом и магнитном полях напряженности E и B соответственно. Определим вектор плотности тока заряда e в точке R, t при его перемещении вдоль кривой $q(t)$ как $j(R, t) = eq'(t)\delta^3(R - q(t))$, где δ^3 - трехмерная дельта-функция. Основным законом эволюции такой системы является система трех уравнений Максвелла и уравнение сохранения заряда:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot E &= 4\pi\rho, \\ \nabla \cdot B &= 0', \\ \nabla \times E &= -\frac{1}{c} \frac{\partial B}{\partial t}, \\ \nabla \times B &= -\frac{1}{c} \left(\frac{\partial E}{\partial t} + 4\pi j \right), \\ \nabla \cdot j &= -\frac{\partial \rho}{\partial t}. \end{aligned} \quad (45)$$

При этом векторный и скалярный потенциалы электромагнитного поля находятся из уравнения

$$E = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}.$$

Рассмотрим импульсные представления величин, участвующих в уравнениях Максвелла:

$$\begin{aligned} A(R, t) &= \sqrt{4\pi c} \int \bar{a}_k e^{ikR} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}, \\ \phi(R, t) &= \int \phi_k(t) e^{ikR} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}, \\ j(R, t) &= \int j_k(t) e^{ikR} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}, \\ \rho(R, t) &= \int \rho_k(t) e^{ikR} \frac{d^3k}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \quad (46)$$

Тогда можно считать (см. ([АВ, FH]), что $\bar{a}_k = (a_{1,k}, a_{2,k})$ - разложение вектора a_k на две компоненты, ортогональные k ; соответствующие им направления называются направлениями поляризации. Мы будем считать, что направления поляризации выбраны для каждого вектора импульса k произвольным образом, и зафиксируем этот выбор.

Действие для такой системы определяется как $S = S_{particles} + S_{field} + S_{int}$, где:

$$\begin{aligned} S_{particles} &= \int \sum_j \left(\frac{mq_j^2}{2} + \sum_l \frac{e_j e_l}{|q_j - q_l|} \right) dt, \\ S_{field} &= \frac{1}{2} \int (a_{1,k}^* a'_{1,k} - k^2 c^2 a_{1,k}^* a_{1,k} + a_{2,k}^* a'_{2,k} - k^2 c^2 a_{2,k}^* a_{2,k}) \frac{d^3 k dt}{(2\pi)^3}, \\ S_{int} &= \sqrt{4\pi} \sum_j \int (a_{1,k} q'_{1,j} + a_{2,k} q'_{2,j}) e^{ikq_j(t)} \frac{d^3 k dt}{(2\pi)^3}, \end{aligned} \quad (47)$$

где $q_{1,j}, q_{2,j}$ - проекции вектора \bar{q} на направления поляризации. Квантовая эволюция рассматриваемой системы получается согласно формулам (25),(24), если в качестве действия S взять сумму действий, определенных формулами (47).

Состояние нашей системы представляется в виде пузыря \mathcal{B} , наполненного квантами амплитуд двух разных типов: кванты амплитуд частиц и кванты амплитуд фотонов векторного поля⁴⁷.

Применим к такой системе многочастичный подход, описанный выше, с учетом того, что фотоны являются частицами - переносчиками поля⁴⁸.

С каждым вектором импульса k свяжем два ортогональных k и друг другу вектора поляризации $p_{k,1}$ и $p_{k,2}$. Опишем кванты амплитуд (векторных) фотонов, так как они обладают некоторой спецификой, связанной с наличием поляризации. Квант амплитуды фотона α будет обладать амплитудой λ_α , координатой $X_{0,\alpha}$, вектором импульса k_α , и осцилляторными координатами $a_{1,\alpha}$, $a_{2,\alpha}$, которые будут являться комплексными числами⁴⁹. Для моделирования эволюции системы частиц в электромагнитном поле надо сначала перейти к импульсному представлению квантов амплитуд, что, согласно предложенному выше рецепту означает домножение их амплитудных частей на фазовый множитель $e^{-ik\bar{x}}$. После этого можно использовать стандартную столкновительную модель с одним небольшим изменением, отражающим специфику взаимодействия поля с частицами. Мы будем считать, что траектория и импульс фотонных квантов амплитуды никак не меняются при их столкновениях друг с другом. Иными словами, импульс k не участвует в процессе изменения амплитуд фотонов (что согласуется с выражением (47), а также и с тем, что координатное представление волновой функции фотона лишено того смысла, который оно имеет для частиц с массой (см. ([AB])).

Как и раньше, мы сперва рассмотрим нашу задачу в урезанном гильбертовом формализме. Пусть квант амплитуды α фотонов спарен с квантом амплитуды β частицы с импульсом $j = k_\alpha$. Преобразования амплитудных частей кванта α фотонов при столкновении с другим фотонным

⁴⁷Если мы хотим и скалярное кулоновское поле разбить на фотоны, что соответствует выводу фотонов из уравнений Максвелла (45) (см., например, ([AB])), мы должны ввести еще и фотоны скалярного поля, то есть ввести частицы - переносчики кулоновского поля, как было описано выше.

⁴⁸Если мы имеем дело со связанными квантами амплитуд, надо считать, что они перераспределяются так, как было указано ранее: квант векторного фотона, исчезающий на периферии пузыря заменяется квантом, эмитируемый одной из заряженных частиц, причем его координата и импульс выбираются случайно из распределения, диктуемого волновой функцией. В случае свободных квантов амплитуды этот механизм воспроизводства квантов амплитуд фотонов дополняется их порождением при столкновении с квантами амплитуд частиц. Описанная схема позволяет вычислять приближенно настоящие физические величины, характеризующие поле. Например, вычисление векторного потенциала A в точке R в момент времени t производится по следующей формуле

$$A(R, t) = \sqrt{4\pi c} \sum_{\tau \in [t, t+\delta t], \alpha(\tau) \in C_R} \bar{X}_{\alpha(\tau)} a^{ik_{\alpha(\tau)} R},$$

получающаяся переводом (46) на квантово-амплитудный язык.

⁴⁹Можно было бы вместо этих координат, связанных с конкретным выбором направлений поляризации, использовать просто вектор поляризации, ортогональный импульсу фотона.

квантом имеет вид

$$\begin{aligned}\lambda'_\alpha &= \lambda_\alpha \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \delta(S_{1,\alpha} + S_{2,\alpha})}, \\ \delta S_{1,\alpha} &= \frac{1}{2} \left[\left| \frac{a_{1,\alpha}(t') - a_{1,\alpha}(t_0)}{t' - t_0} \right|^2 + \left| \frac{a_{2,\alpha}(t') - a_{2,\alpha}(t_0)}{t' - t_0} \right|^2 - k_\alpha^2 c^2 (|a_{1,\alpha}|^2 + |a_{2,\alpha}|^2) \right] (t' - t_0), \\ S_{2,\alpha} &= \frac{\sqrt{4\pi}}{(2\pi)^3} \text{sign}(e_\beta) \left(a_{1,\alpha} \frac{x_{1,\beta}(t') - x_{1,\beta}(t_1)}{t' - t_1} + a_{2,\alpha} \frac{x_{2,\beta}(t') - x_{2,\beta}(t_1)}{t' - t_1} \right) e^{ij \cdot x_\beta} (t' - t_0),\end{aligned}$$

где $x_{1,\beta}$, $x_{2,\beta}$ - компоненты разложения вектора x_β вдоль $p_{k,1}$ и $p_{k,2}$; причем если квант α объединен в кортеж с другими квантами частиц, то в элемент действия надо добавить соответствующие им слагаемые. Рассмотрим теперь преобразование амплитудных частей частичного кванта β при его столкновении с квантом того же типа. Пусть, например, он объединен в кортеж с α и с квантом γ амплитуд (другой) частицы. Тогда амплитудная часть будет преобразована так:

$$\begin{aligned}\lambda'_\beta &= \lambda_\beta \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \delta(S_{3,\alpha} + S_{2,\alpha})}, \\ \delta S_{3,\alpha} &= \frac{m \text{sign}(e_\beta) (x_\beta(t') - x_\beta(t_1))^2}{2} + \frac{e_\beta e_\gamma}{|x_\beta(t') - x_\gamma(t')|} dt,\end{aligned}$$

Если квант β объединен в кортеж с другими квантами амплитуд частиц, то в элемент действия надо добавить соответствующие слагаемые.

Для перехода к химическому формализму мы должны будем сделать точно такие же изменения в предложенной схеме, что и в случае осциллятора и частицы.

Приложение 2. О моделировании лоренц-инвариантности

Целью данного приложения является демонстрация того, как алгоритмический подход согласуется с инвариантностью физических законов относительно преобразований Лоренца. Лоренц-инвариантность является отправной точкой релятивистской физики. Она означает сохранение псевдоевклидовой метрики пространства-времени при переходе от одной инерциальной системы координат к другой. Под "физическими законами" мы будем понимать описание событий, происходящие на некотором отрезке траектории точечной частицы в пространстве-времени с координатами x, y, z, t . При этом если мы выражаем такие законы дифференциальными уравнениями, надо считать, что этот отрезок очень мал (по сравнению с длиной траектории) и имеет координаты dx, dy, dz, dt . Псевдоевклидова метрика задается как $ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 - dt^2$ (мы выбираем систему единиц так, чтобы скорость света была равна единице. Тогда лоренц-инвариантность означает, что если мы через штрихованные переменные обозначим значение соответствующих величин в другой инерциальной системе координат, то должно выполняться равенство $ds^2 = ds'^2$. Для того, чтобы обсудить, как можно было бы представлять этот факт при алгоритмическом подходе, нам надо представить вычислительную сеть, соответствующую заданной инерциальной системе, чему посвящен следующий параграф.

4.1 Многоголовочные машины Тьюринга

Мы примем формализацию алгоритмов в виде многоголовочных машин Тьюринга⁵⁰.

Дадим формальное определение многоголовочных машин Тьюринга. Такая машина состоит из трех объектов: набора лент, разбитых на ячейки, набора головок, и набора правил передвижения головок, которые имеют вид:

$$a_{j_1}, a_{j_2}, \dots, a_{j_l}; q_{k_1}, q_{k_2}, \dots, q_{k_l} \longrightarrow a_{j'_1}, a_{j'_2}, \dots, a_{j'_l}; q_{k'_1}, q_{k'_2}, \dots, q_{k'_l}; S_{r_1}, S_{r_2}, \dots, S_{r_l}$$

⁵⁰ Нашей идее отвечает также формализация в виде нормальных алгоритмов Маркова. Формализация в виде клеточных автоматов не подходит, поскольку она не дает возможности моделировать квантовое дальноедействие.

где a_{j_t} , q_{k_t} обозначают содержимое ячейки, обозреваемой t головкой и состояние t головки до применения правила, штрихованные символы обозначают те же величины после применения правила, а S_{r_t} обозначает то перемещение, которое надо совершить над t головкой, и принимает одно из значений: сдвиг право, сдвиг влево, и неподвижна. Можно на одном и том же наборе лент запустить несколько машин Тьюринга, причем сделать правила для них зависящими не только от содержимого ячеек ленты и состояния головок данной машины, но и от того, какими головками каких машин обозревается ли та или иная ячейка. Эти усложненные правила выглядят так:

$$a_{j_1}, a_{j_2}, \dots, a_{j_l}; q_{k_1}, q_{k_2}, \dots, q_{k_l}; \bar{x}_{h_1}, \bar{x}_{h_2}, \dots, \bar{x}_{h_l} \longrightarrow a_{j'_1}, a_{j'_2}, \dots, a_{j'_l}; q_{k'_1}, q_{k'_2}, \dots, q_{k'_l}; S_{r_1}, S_{r_2}, \dots, S_{r_l}$$

где \bar{x}_{h_t} - кортеж, состоящий из пар вида: (номер головки, номер соответствующей ей машины) для всех головок, обозревающих ячейку, которую обозревает t головка данной машины. Таким образом, машины будут взаимодействовать. Можно считать, что каждому многочастичному кванту амплитуды соответствует одна машины Тьютинга, так что число головок в ней равно числу частиц, находящихся в запутанном состоянии. Число головок в машине Тьюринга никак не повлияет на наши выводы, однако можно считать, что у каждой машины их ровно две, что будет соответствовать иерархической модели для многочастичных квантовых состояний. В терминах многоголовочных машин Тьюринга легко описывать квантовую нелокальность, так как она заключена в самих правилах для машины. Например, для пары запутанных фотонов каждая из двух головок указывает на пространственное положение их квантов амплитуды, которые формируют пару. Таким образом, например, при создании локальных условий, которые приводят к исчезновению одного из таких квантов исчезновение сразу обоих не требует никакого специального "сигнала", распространяющегося от одного к другому кванту, а может быть выполнено простым правилом для такого типа машин. Реализация правил для многоголовочных машин Тьюринга является работой административной части модели.

Многоголовочные машины Тьюринга дают единственную трактовку одновременности событий в квантовой механике, которая вытекает из запутанности частиц. Такая одновременность заключается в применении правила к набору пространственно удаленных головок. Никакого другого простого способа введения одновременности, по-видимому, не существует.

4.2 Почему для моделирования нужно квадратичное число шагов

Всякую инерциальную систему отсчета будем представлять как многоголовочную машину Тьюринга. Ее память будет, таким образом, моделью пространства в этой инерциальной системе. Эта система используется в качестве измерительной линейки при описании динамики объектов, которые в этой системе никак не представлены, например, частиц, перемещающихся относительно этой системы. Эта измерительная линейка физически является твердым объектом, состоящим из атомов. Если у нас имеется две такие системы, одна из которых движется относительно другой с постоянной скоростью, то сохранение псевдо-евклидовой метрики будет означать правило согласования при переходе от описания одного и того же процесса в обеих системах. Такие правила должны учитывать алгоритмическое описание динамики в обеих системах, в частности, ограничение на максимально допустимую скорость перемещения частиц в пользовательском секторе, и поэтому, например, здесь будет неприменимо правило сложения скоростей. То есть правило согласования должно быть определено не классическим. Мы приведем один довод в пользу того, что это правило должно давать именно сохранение псевдо-евклидовой метрики.

Как было отмечено выше, формальное понятие одновременности событий для машин Тьюринга не является физически адекватным. Одновременность имеет место только для ячеек, обозреваемых головками машины в момент применения к этим головкам какого-нибудь правила данной машины. Для отсчета времени в данной инерциальной системе надо применять стандартный физический

процесс, например, пролет фотона через цепочку атомов, расположенных вдоль рассматриваемой траектории. Поскольку это явление описывается средствами квантовой физики, например, в терминах квантов амплитуд, при моделировании промежутка времени dt мы должны по-очереди рассмотреть все пары точек на рассматриваемой траектории (и даже в некоторой ее окрестности, о которой можно предполагать, что ее толщина фиксирована и не зависит от длины траектории). Каждая такая пара соответствует начальной и конечной точке кванта амплитуды фотона при пересчете его волновой функции в следующий момент времени⁵¹. Для моделирования внутренних процессов в нашей измерительной системе за время dt нужно использовать все состояния двухголовочной машины Тьюринга, действующей на ленте размера dt , то есть порядка dt^2 элементарных операций.

Теперь рассмотрим процесс наблюдения за событиями, происходящими с частицами, не входящими в данную измерительную линейку. При таком процессе у нас появятся пары головок, которые могут отстоять друг от друга на расстояние порядка элемента длины $dS = \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2}$. Например, если такой не входящий в измерительную линейку атом излучает фотон, разные кванты амплитуд могут излучаться, когда этот атом занимает разные положения относительно нашей измерительной линейки. При этом все внешние частицы в нашей измерительной линейке представляются с помощью тех же ячеек на ленте, что и внутренние части самой линейки. То есть для моделирования всех процессов, и внутренних и внешних, необходимо общее число элементарных операций, которое зависит от dS квадратично. При этом коэффициент пропорциональности не зависит от dt и определяется моментом начала и конца моделирования, а не внутренним временем данной системы отсчета. Если мы хотим узнать, сколько вычислительных шагов у нас есть, чтобы моделировать поведение внешней системы, мы должны вычесть из общего числа операций число операций на моделирование внутренних процессов в системе. То есть у нас получится величина вида $c_1 dS^2 - c_2 dt^2$. Теперь можно предположить, что это число шагов для моделирование внешней, то есть измеряемой системы, является мерой сложности ее описания в данной системе отсчета. И эквивалентность инерциальных систем тогда проявляется в том, что эта мера сложности должна быть одинакова для разных инерциальных систем, что и дает нам сохранение псевдо-евклидовой метрики при переходе от одной системы к другой. Итак, квадратичная зависимость числа шагов алгоритма от физических значений длины и времени вытекает из метода подсчета волновой функции по методу траекторий Фейнмана, если мы применим для такого подсчета их дискретизацию через кванты амплитуд.

Такое описание, естественно, не является строгим, и тем более не претендует на то, чтобы быть единственно возможным. Мы привели его только для того, чтобы показать, что алгоритмический подход не противоречит лоренц-инвариантности законов природы.

⁵¹ Это не противоречит тому, что скорость всех фотонов одинакова, и тому, что все кванты амплитуд фотонов не могут перемещаться быстрее нее. Скорость фотона возникает после интерференции всех амплитудных квантов. При этом некоторые из них могут взаимодействовать с атомами так, как было описано в Приложении 1.