

Quantenmechanische Anomalien beim Transport über Baumstrukturen

Jens Höfflin

14.06.2005

Studenten Seminar „Dynamische
Modelle komplexer Systeme“

Übersicht

1. Motivation
2. CTRW-Theorie (klassisch und quantenmechanisch)
3. 2 Beispiele
4. Zusammenfassung

Motivation

- Viele klassische Algorithmen (s-t connectivity, SAT,...) basieren auf Random Walks
- Damit ergibt sich natürlicherweise die Frage, ob Quanten Random Walks auf Quantencomputern ebenso nützlich sind
- Viele Algorithmen liegen in NP, ist das auch mit Quanten Random Walks so?
- Die große Frage der Informatik, ist $P = NP$?

Ein wenig Theorie

- Ein Graph besteht aus einer Menge Knoten, die über Kanten miteinander verbunden sind
- Beschreibung über Transfermatrix M

$$M_{ab} = \begin{cases} -\gamma & a \neq b, a \text{ und } b \text{ verbunden} \\ 0 & a \neq b, a \text{ und } b \text{ nicht verbunden} \\ k\gamma & a = b \end{cases}$$

- γ ist die Übergangsrate, k die Anzahl der Benachbarten Knoten

Ein wenig Theorie

- Ein zeitkontinuierlicher Random Walk ist ein Markov-Prozess
- Dynamik wird beschrieben mit der Master Gleichung

$$\frac{dp_{jk}(t)}{dt} = -\sum_l M_{jl} p_{lk}(t)$$

- Hierbei ist $p_{jk}(t)$ die bedingte Wahrscheinlichkeit am Knoten j zum Zeitpunkt t zu sein, unter der Bedingung zum Zeitpunkt $t=0$ am Knoten k gestartet zu sein
- Es gilt: $\sum_j p_{jk}(t) = 1$
- Bei n Knoten sind dies also n gekoppelte Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten
- Formale Lösung: $p_{jk}(t) = \langle j | e^{-Mt} | k \rangle$

Ein wenig Theorie

- Im quantenmechanischen Fall bilden die Knoten die Basis des Hilbertraums
- Beschreibung mit Schrödingergleichung

$$i \frac{d}{dt} |k\rangle = H |k\rangle$$

- Analog zum klassischen Random Walk wird der Hamiltonian durch die Matrixeinträge von M definiert

$$\langle a | H | b \rangle = M_{ab}$$

- Formale Lösung

$$\alpha_{jk}(t) = \langle j | e^{-iHt} | k \rangle$$

- Übergansamplitude vom Zustand $|k\rangle$ zum Zeitpunkt $t = 0$ in Zustand $|j\rangle$ zum Zeitpunkt t

Ein wenig Theorie

- Diese Übergansamplitude genügt der Gleichung

$$i \frac{d}{dt} \alpha_{jk} = \sum_l H_{jl} \alpha_{lk}(t)$$

- Es gilt: $\sum_j |\alpha_{jk}(t)|^2 = 1$

Ein wenig Theorie

- Klassisch ist die Grenzverteilung definiert als

$$\pi_{ba} = \lim_{T \rightarrow \infty} p_{ba}(T)$$

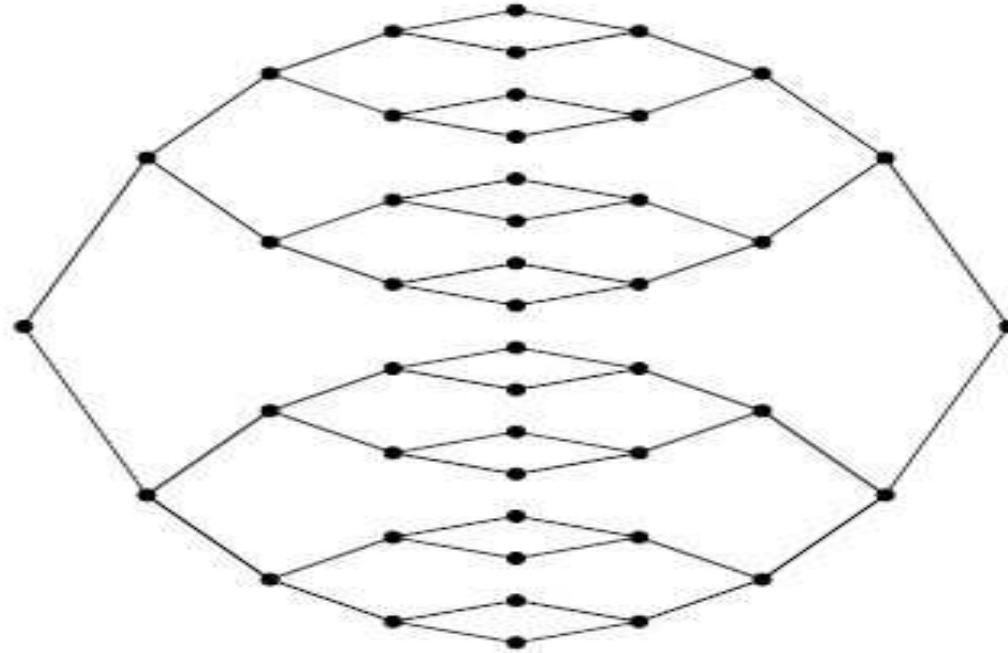
- Dies ergibt eine Gleichverteilung

$$\pi_{ba} = \frac{1}{\# \text{Knoten}}$$

- Quantenmechanisch verhindert die Unitarität, dass sich ein Gleichgewichtszustand einstellt
- Verwende stattdessen das Langzeitmittel der Übergangsamplituden

$$\chi_{ba} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |\langle b | e^{-iHt} | a \rangle|^2 dt$$

1. Beispiel



- Obiger Graph vom Typ G_n (Cayley Baum) soll von links nach rechts (von oben nach unten) durchlaufen werden
- Vergleich der Ergebnisse zwischen „Klassischem“- und „Quanten“-Random Walk

1. Beispiel

- In unserem Fall G_n mit $2^{n+1} + 2^n - 2$ Knoten
- Bestehen aus 2 Binärbäumen der Tiefe n , die in der Mitte „zusammengeklebt“ werden

1. Beispiel

- Klassisch kann die Effizienz, den Baum zu durchqueren, grob abgeschätzt werden
- Hierzu müssen wir uns nur überlegen wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, einen Schritt vorwärts zu machen
- Bis zur Mitte kommen wir recht schnell voran, da wir 2:1 Möglichkeiten haben vorwärts zu gehen
- Ab der Mitte ist die Situation dann umgekehrt
- Grob abgeschätzt kann man also sagen, dass wie Wahrscheinlichkeit den Baum zu durchqueren

$$p \leq 2^{-n}$$

ist, also exponentiell mit der Anzahl Konten sinkt

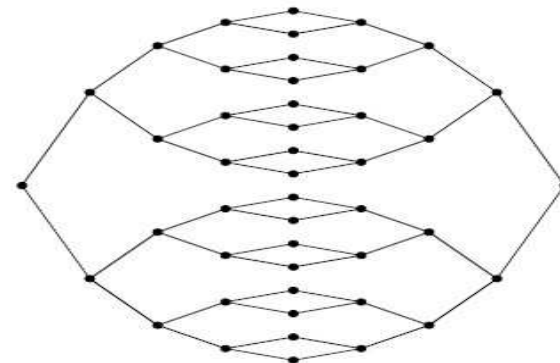
1. Beispiel

- Um das quantenmechanische Problem zu lösen wollen wir es zuerst etwas vereinfachen:
- Symmetrie ausnutzen
- Hierzu führen wir Spaltenzustände ein

$$|col\ j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_j}} \sum_{a \in col\ j} |a\rangle$$

- Wobei N_j die Anzahl der Knoten der Spalte j ist

$$N_j = \begin{cases} 2^j & 0 \leq j \leq n \\ 2^{2n-j} & n \leq j \leq 2n \end{cases}$$



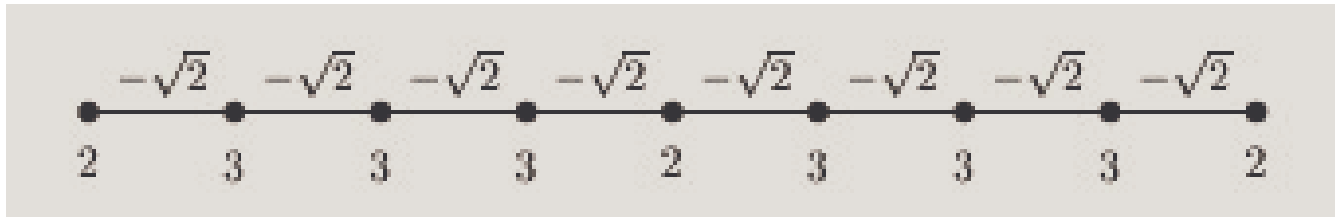
1. Beispiel

- $|col\ j\rangle$ ist eine total symmetrische Überlagerung der Knotenzustände einer Spalte j
- Das Problem vereinfacht sich zu einer linearen Kette
- Ausrechnen der Übergangsamplituden zwischen den Spaltenzuständen

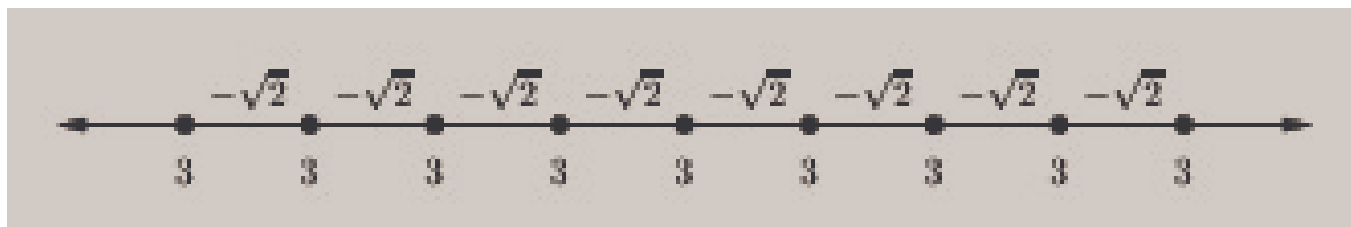
$$\langle col\ j | H | col\ j+1 \rangle = -\sqrt{2}\gamma$$

$$\langle col\ j | H | col\ j \rangle = \begin{cases} 2\gamma & j = 0, n, 2n \\ 3\gamma & \text{sonst} \end{cases}$$

1. Beispiel

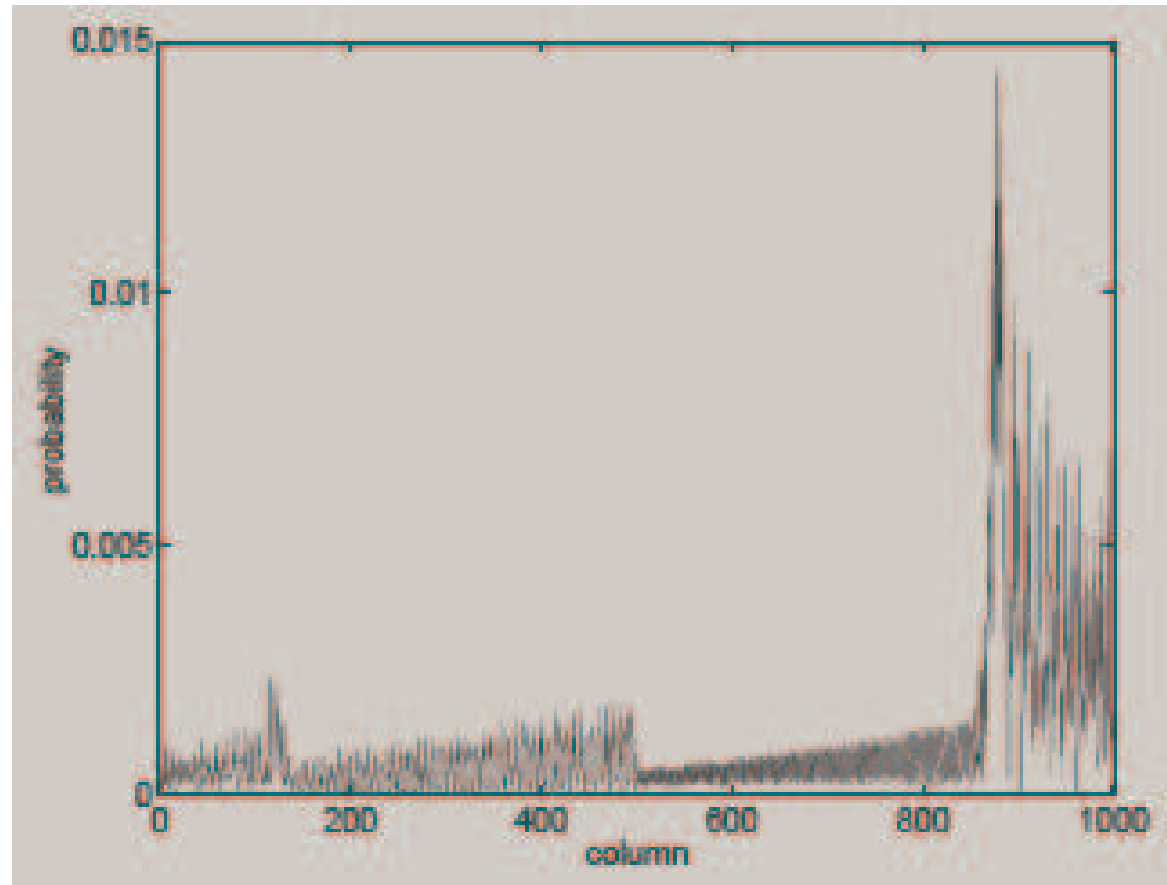


- Reduktion von G_4 zu einer linearen Kette
- Um das Problem Analytisch zu lösen vereinfachen wir noch weiter und betrachten eine unendlich lange lineare Kette



$$\langle m | e^{-iHt} | l \rangle = e^{-i3\gamma t} i^{m-l} J_{m-l}(2\sqrt{2}\gamma t)$$

1. Beispiel



Numerische Lösung für $n = 500$
Zeiten $t = 100, 250$ und 400

Also 1001 Spalten,
Ca. 2^{500} Knoten !!!

1. Beispiel

- Berechnung der „Grenzverteilung“

$$\chi_{ba} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |\langle b | e^{-iHt} | a \rangle|^2 dt$$

- Einschreiben eines Vollständigen Satzes von Basiszuständen

$$\begin{aligned} \chi_{ba} &= \sum_{r,s} \langle b | E_r \rangle \langle E_r | a \rangle \langle a | E_s \rangle \langle E_s | a \rangle \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T e^{-i(E_r - E_s)t} dt \\ &= \sum_r |\langle a | E_r \rangle|^2 |\langle b | E_r \rangle|^2 \end{aligned}$$

1. Beispiel

- Dies wird nun mit der Cauchy-Schwartz Ungleichung abgeschätzt

$$\sum_r |\langle col\ 0 | E_r \rangle|^4 \sum_s 1 \geq \sum_r |\langle col\ 0 | E_r \rangle|^2 = 1$$

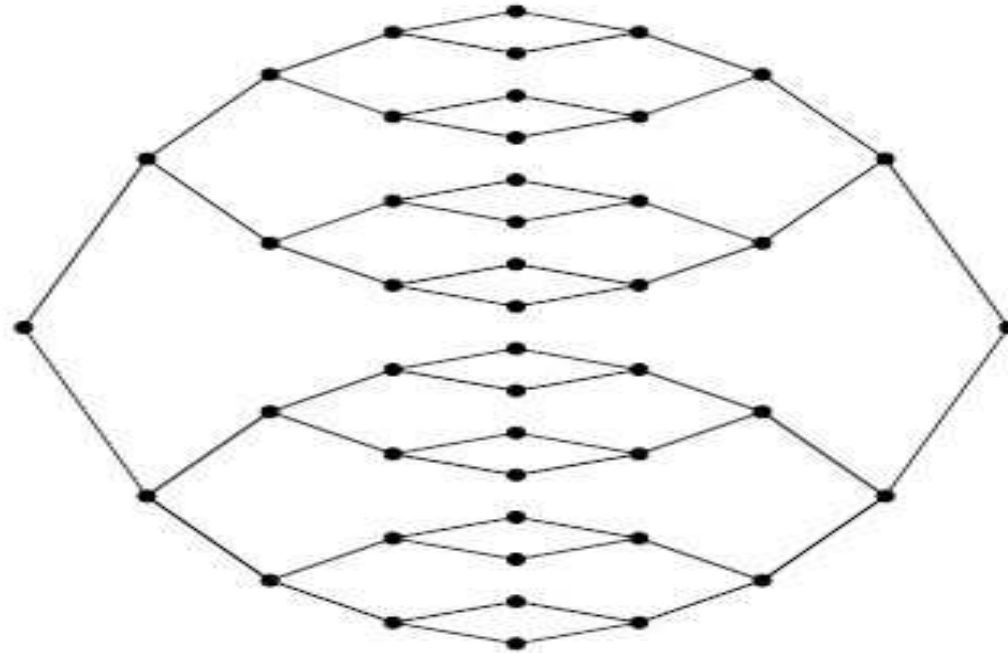
- Damit ergibt sich

$$\chi_{col\ 2n} \geq \frac{1}{2n+1}$$

- Also ein erheblich größerer Wert als im klassischen Fall

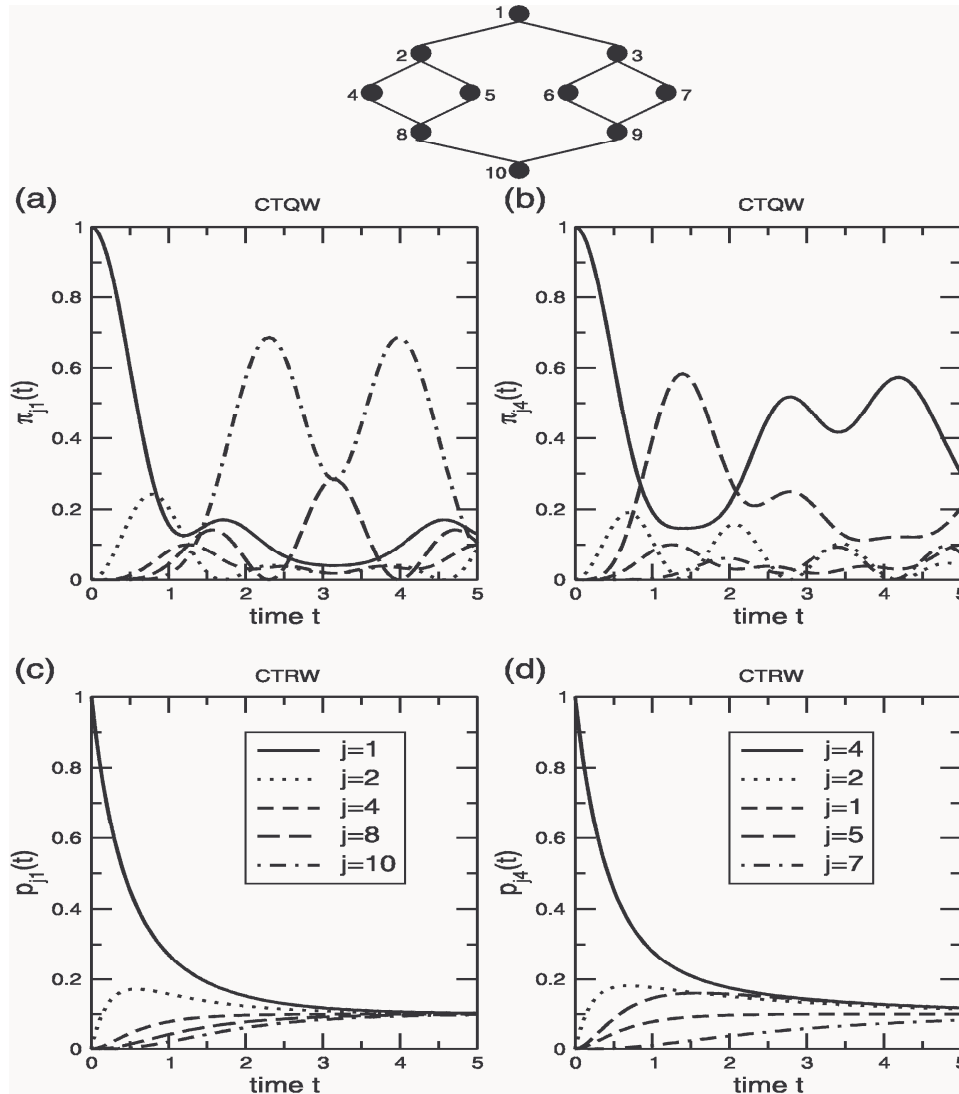
2. Beispiel

- Ein zweites Beispiel (eigentlich das gleiche nochmal, nur diesmal anders)



- Nun wollen wir untersuchen wie sich die Sache verhält, wenn wir von oben nach unten gehen wollen

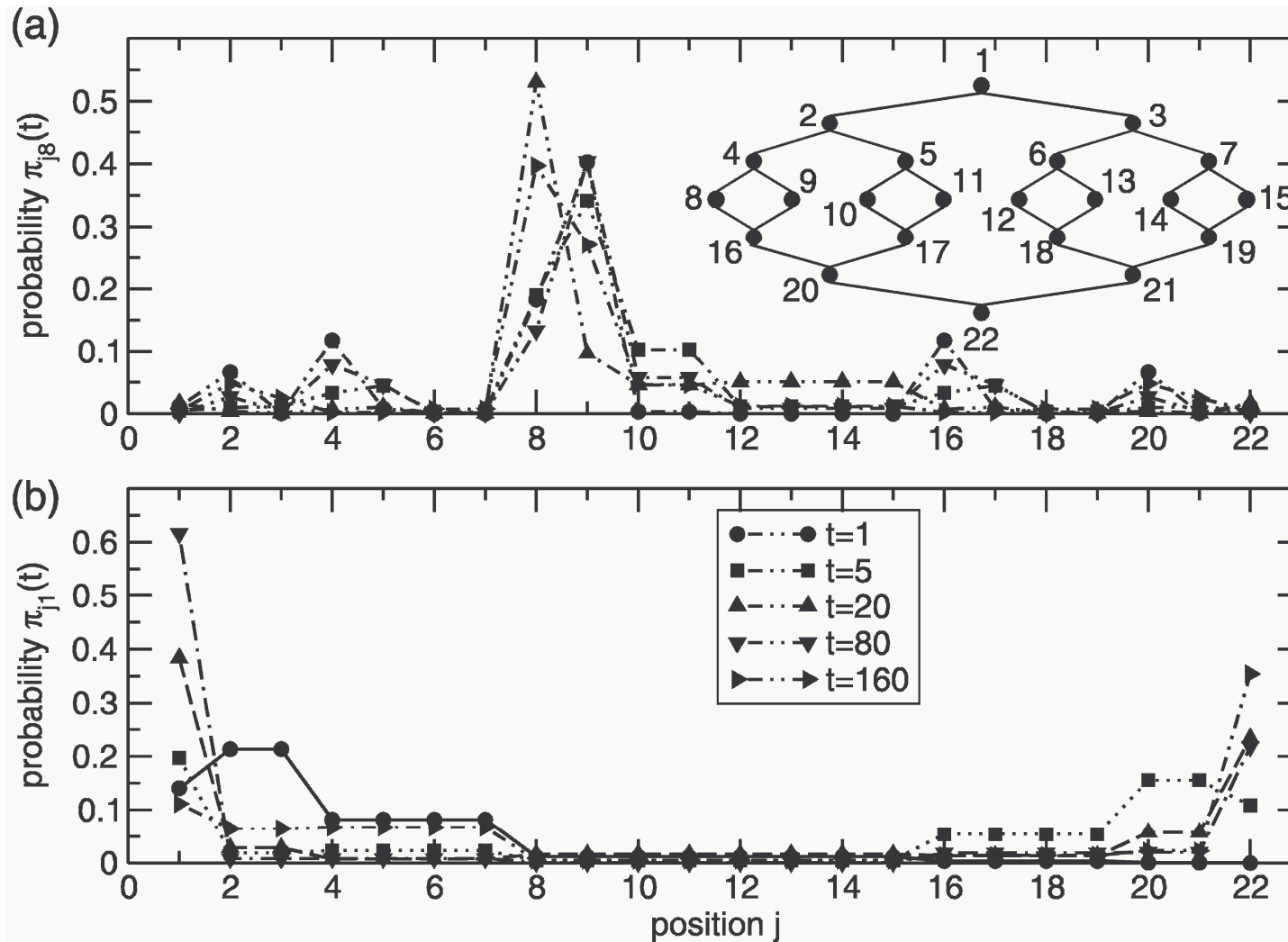
2. Beispiel



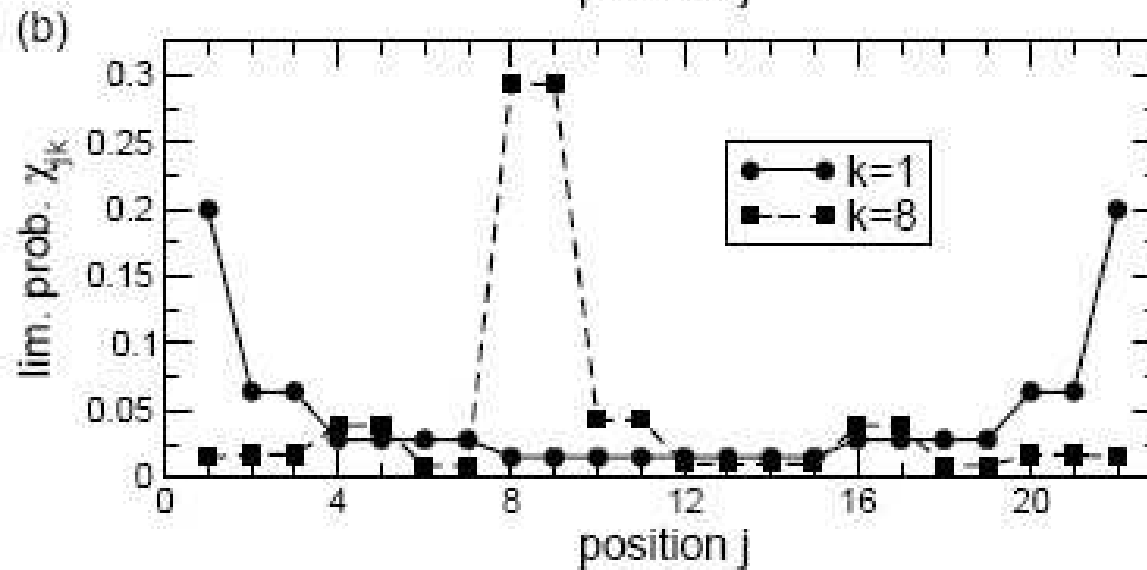
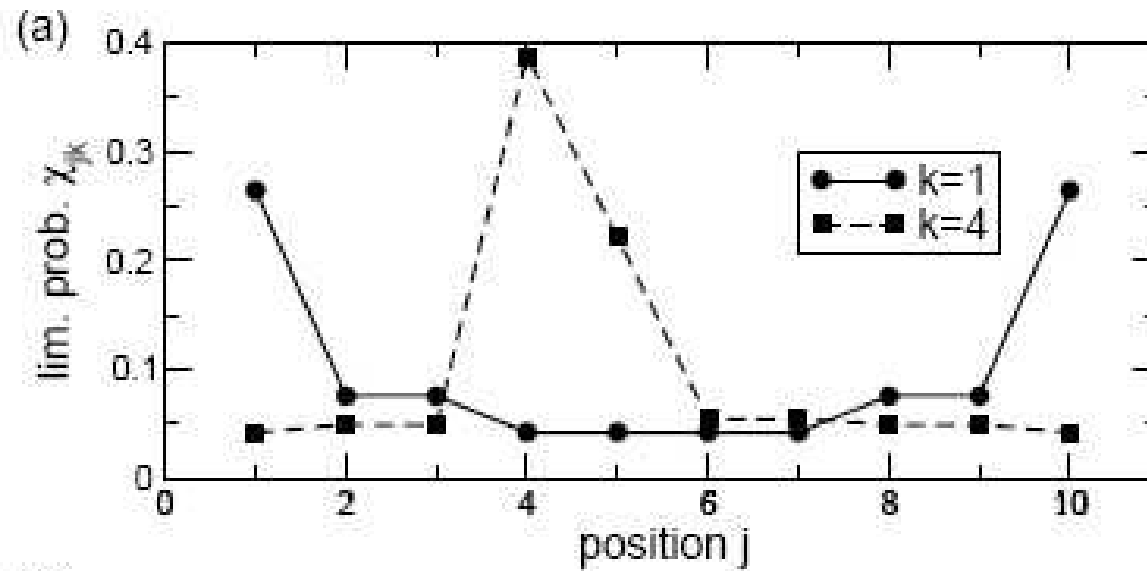
$$\chi_{10,1} = 0,2644 > \frac{1}{10}$$

$$\chi_{7,4} = 0,0545 < \frac{1}{10}$$

2. Beispiel



2. Beispiel



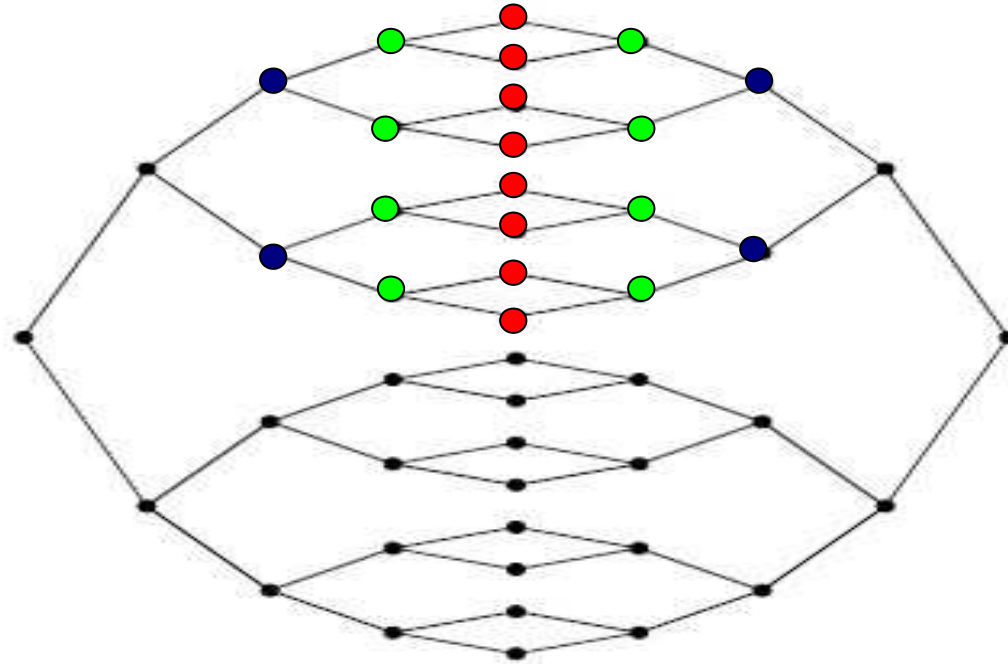
2. Beispiel

- Auch hier kann man Symmetrie ausnutzen, um das Problem zu vereinfachen
- Dies zerstört aber den Effekt des langsamen Transports
- Aufteilen der Knoten zu Clustern

$$|a_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_k}} \sum_{n \in k} |n\rangle$$

- Alle Knoten des $k+1$ Clusters sind durch eine Verbindung mit dem k Cluster verbunden, gehören gleichzeitig aber nicht dem $k-1$ Cluster an

2. Beispiel



- Anzahl der Knoten im Cluster k sei d_k
 $d_k = 2^{G-k+1} \quad k \in [2, G] \quad d_1 = d_{2G+1} = 2^{G-1}$
 $d_k = d_{2G+2-k} \quad d_{G+1} = 2$

2. Beispiel

- Der neue Hamiltonian ergibt sich zu

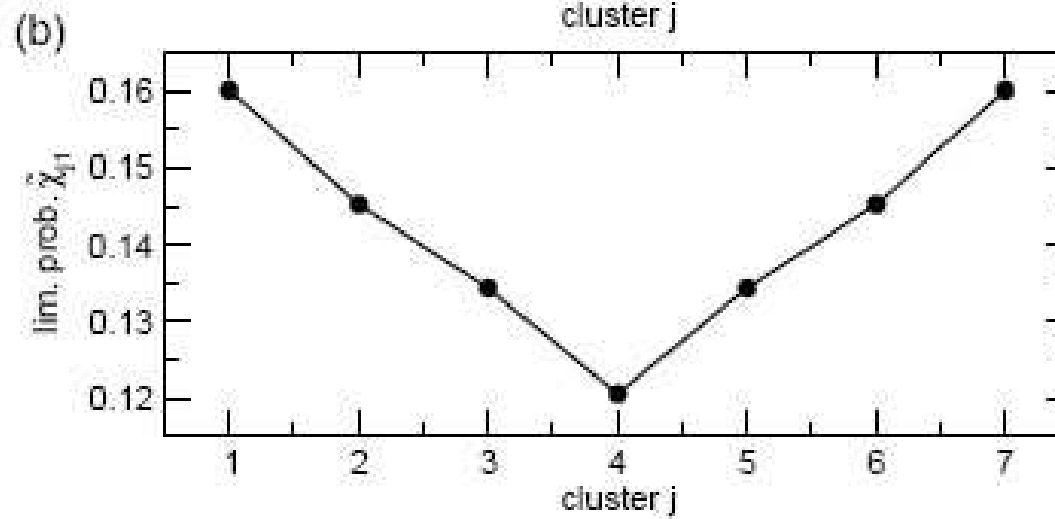
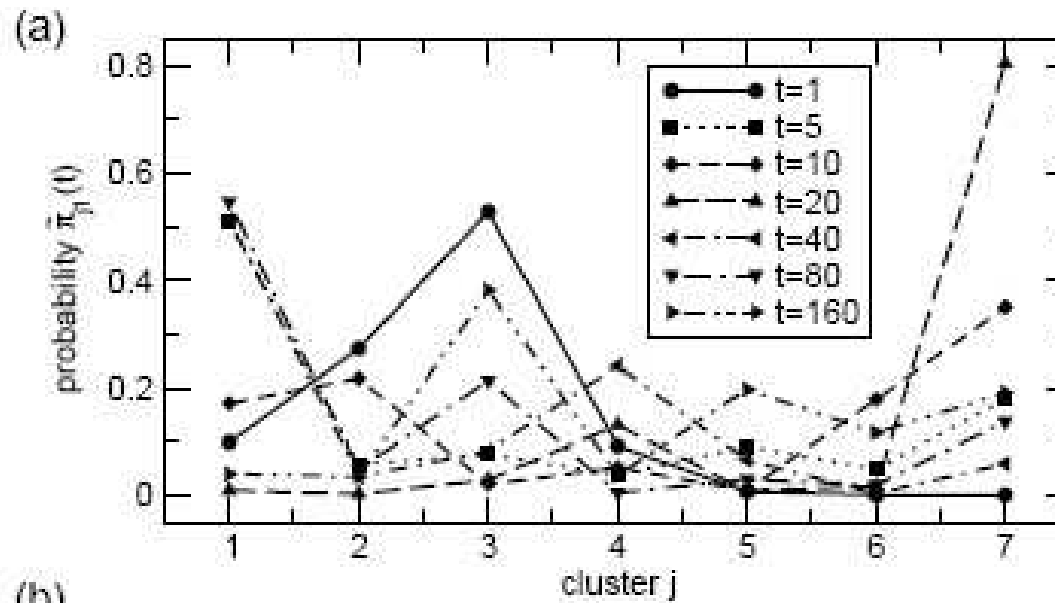
$$\tilde{H}_{jk} = \langle a_j | H | a_k \rangle$$

- Die neuen Einträge können ausgerechnet werden

$$\tilde{H}_{kk} = \langle a_k | H | a_k \rangle = \frac{1}{d_k} \sum_{\substack{n \in k \\ n' \in k}} \langle n' | H | n \rangle = f_n \equiv f_k$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{k,k+1} &= \tilde{H}_{k+1,k} = \langle a_k | H | a_{k+1} \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{d_k d_{k+1}}} \sum_{\substack{n \in k \\ n' \in k+1}} \langle n' | H | n \rangle = -\frac{b_k}{\sqrt{d_k d_{k+1}}} \end{aligned}$$

2. Beispiel



Zusammenfassung

- Wie wir gesehen haben verhalten sich die klassische und quantenmechanische Random Walk sehr unterschiedlich
- Im quantenmechanischen Fall hängt die Durchlaufgeschwindigkeit sehr stark vom Startpunkt ab
- Im besten Fall erhält man einen exponentiellen Geschwindigkeitsvorteil

Literatur

- [1] M.Childs, E.Farhi, S.Gutmann, An example of the difference between quantum and classical random walks, Quantum Information Process. **1**, 35 (2002)
- [2] O.Mülken, A.Blumen, Slow transport by continuous time quantum walks, Phys. Rev. E, **71**, 016101 (2005)
- [3] J.Kempe, Quantum random walks – an introductory overview, Contemp. Phys., **44**, 307 (2003)