

# Empleo de Autómatas Celulares en Problemas Sencillos de Mecánica Cuántica.

Grupo de Simulación de Sistemas Físicos

Eduardo J. Ortega U.\*

Dirigido por: Dr. José Daniel Muñoz

4 de mayo de 2004

---

\*ejortegau@unal.edu.co



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



*Presentación*



*Página 1 de 26*

*Pantalla Completa*

*Cerrar*

*Salir*

# 1. Autómata celular de difusión 1D

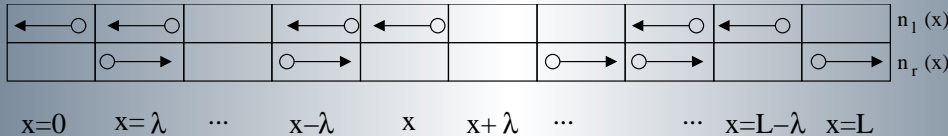


Figura 1: Un estado posible para el autómata de difusión

Evolución en dos fases: Movimiento y colisión. En el límite continuo (Expansión de Chapman-Enskog) la regla de evolución define la ecuación de difusión unidimensional dada por

$$\partial_t \rho = \frac{p}{2(1-p)} \partial_r^2 \rho. \quad (1)$$

## 1.1. Expansión de Chapman-Enskog para el autómata de difusión

$n_l(0)$	$n_l(1)$		$n_l(x-1)$	$n_l(x)$	$n_l(x+1)$			$n_l(N-2)$	$n_l(N-1)$
$n_r(0)$	$n_r(1)$		$n_r(x-1)$	$n_r(x)$	$n_r(x+1)$			$n_r(N-2)$	$n_r(N-1)$

$x=0$      $x=\lambda$     ...     $x-\lambda$      $x$      $x+\lambda$     ...    ...     $x=L-\lambda$      $x=L$

Figura 2: Autómata celular unidimensional de dos componentes para modelos de difusión

La regla de evolución se escribe como

$$n_l(x - \Delta x, t + \Delta t) = (1 - \mu(x, t))n_r(x, t) \quad (2)$$

$$+ \mu(x, t)n_l(x, t), \quad (3)$$

$$n_r(x + \Delta x, t + \Delta t) = \mu(x, t)n_l(x, t) \quad (4)$$

$$+ (1 - \mu(x, t))n_r(x, t). \quad (5)$$

Regla promediada sobre muchas ejecuciones del autómata se ree-



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 3 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir

scribe como

$$N_l(x - \Delta x, t + \Delta t) - N_l(x, t) = (p - 1)(N_l(x, t) - N_r(x, t)), \quad (6)$$

$$N_r(x + \Delta x, t + \Delta t) - N_r(x, t) = (p - 1)(N_r(x, t) - N_l(x, t)). \quad (7)$$

Expandimos perturbativo izquierda y Taylor derecha. La densidad de partículas en un sitio dado es  $\rho(x, t) = N_l(x, t) + N_r(x, t)$ . Se **supone**  $\rho(x, t) = N_l^{(0)}(x, t) + N_r^{(0)}(x, t)$ . El lado izquierdo puede expandirse como

$$N_i(x + c_i \Delta x, t + \Delta t) - N_i(x, t) = \left( \Delta t \partial_t + \frac{(\Delta t)^2}{2} \partial_t^2 + \Delta x c_i \partial_r + \frac{(\Delta x)^2}{2} \partial_r^2 + \Delta t \Delta x \partial_t \partial_r \right) N_i(x, t) \quad (8)$$

Escalando  $\Delta x = \epsilon$  y  $\Delta t = \epsilon^2$  y comparando orden a orden con el lado derecho se tiene:

- A orden cero:

$$N_l^{(0)}(x, t) = N_r^{(0)}(x, t) = \rho(x, t)/2. \quad (9)$$



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 4 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir

- A orden uno:

$$N_i^{(1)} = \frac{1}{4(p-1)} c_i \partial_r \rho. \quad (10)$$

- A orden dos:

$$\sum_{i=1}^2 \left[ \partial_t N_i^{(0)} + c_i \partial_r N_i^{(1)} + \frac{1}{2} \partial_r^2 N_i^{(0)} \right] = 0 \quad (11)$$

Combinando estos resultados se obtiene ecuación de difusión

$$\partial_t \rho = \frac{p}{2(1-p)} \partial_r^2 \rho. \quad (12)$$



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 5 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir

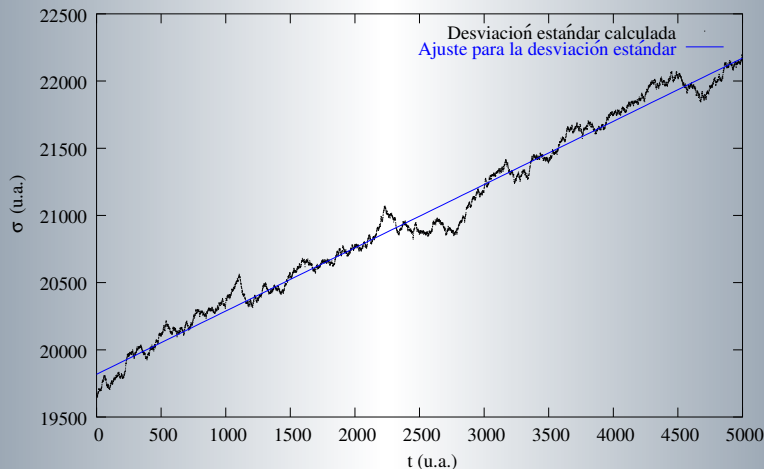


Figura 3: Cuadrado de la desviación estándar en función del tiempo para una condición inicial de distribución gaussiana en el autómata de difusión 1D. La pendiente esperada de (12) con  $p = 0,5$  es  $\frac{1}{2}$ , frente a una pendiente ajustada de  $D = 0,47$

## 2. Autómatas Celulares Cuánticos (QCA)

### 2.1. Trabajo previo

- Feynman propone un autómata celular que en la evolución calcula integral de camino con acción proporcional al número de cambios de dirección.
- Grösing y Fussy proponen autómata celular, pero falla porque su regla de evolución no era unitaria.
- Succi y Benzi muestran que ecuaciones de *lattice Boltzmann* de fluidos pueden extenderse a mecánica cuántica.
- Boghosian, Taylor IV, y Meyer implementan QCA 1D con reglas basadas en las del autómata de difusión.



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 7 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir

## 2.2. QCA propuesto por D. A. Meyer y B. M. Boghosian

Similar al autómata de difusión. Se construye espacio de kets del autómata como

$$\{|x\rangle\} \otimes \{|i\rangle\}, i \in \{l, r\}. \quad (13)$$

Se satisface a relación de completez

$$\hat{1} = \sum_{i=l}^r \int_{-\infty}^{\infty} |x, i\rangle \langle x, i| dx \quad (14)$$

$$= \lim_{a \rightarrow \infty} \sum_{i=l}^r \sum_{n=0}^{N-1} \int_{-a+n\Delta x}^{a+(n+1)\Delta x} |x, i\rangle \langle x, i| dx, \quad N = \frac{2a}{\Delta x}. \quad (15)$$



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 8 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir



Para simulación,  $a$  finito y  $x \approx \text{cte} = x_n$  en cada intervalo de integración. Reescribimos como

$$\hat{1} = \sum_{i,n} |x_n, i\rangle \langle x_n, i| \int_{-a+n}^{-a+(n+1)} dx \quad (16)$$

$$\hat{1} = \sum_{i=l}^r \sum_{n=0}^{N-1} |x_n, i\rangle \langle x_n, i|. \quad (17)$$

Estado en todo tiempo dado por:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{x,i} \psi_i(x, t) |x, i\rangle, \quad (18)$$

con  $i \in \{l, r\}$  y  $|\psi_i(x, t)\rangle = \langle x, i | \Psi(t) \rangle$ .



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 9 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir

Evolución en dos fases análogas a difusión. Se escribe como

$$\psi_l(x - \Delta x, t + \Delta t) = p\psi_l(x, t) + q\psi_r(x, t) \quad (19)$$

$$\psi_r(x + \Delta x, t + \Delta t) = q\psi_l(x, t) + p\psi_r(x, t), \quad (20)$$

con  $p$  y  $q$  amplitudes de probabilidad de seguir en la misma dirección o de rebotar. Satisfacen

$$|p|^2 + |q|^2 = 1 \quad (21)$$

$$p^*q + pq^* = 0 \quad (22)$$

para garantizar evolución unitaria.

Estas reglas llevan en límite continuo a:

$$\partial_t \Psi = \frac{i}{2m} \partial_x^2 \Psi, \quad (23)$$

con  $m = \tan \frac{\theta}{2}$  cuando se parametrizan  $p$  y  $q$  como  $p = \cos \theta$  y  $q = -i \sin \theta$ .

Inclusión de potencial se logra multiplicando por una fase  $e^{-i\epsilon^2 V(x)}$  en cada paso de tiempo.



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 10 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir

## 2.3. Expansion de Chapman - Enskog para el autómata de D. A. Meyer

La regla de evolución del autómata está dada por

$$\psi_i(x + c_i \epsilon, t) = \sum_j S_{i,j} \psi_j(x, t - \Delta t), \quad (24)$$

donde  $S$  es la matriz de colisión del autómata dada por

$$S = e^{-i\epsilon^2 V(x)} \begin{pmatrix} p & q \\ q & p \end{pmatrix}, \quad (25)$$

y  $c_i = \begin{cases} 1, & i = r \\ -1, & i = l \end{cases}$ . Definiendo la función

$$\phi(x, t) = S^{-\tau} \psi(x, t), \quad \tau = t / \Delta t$$

podemos escribir

$$\begin{aligned} \phi(x, t) - \phi(x, t - \Delta t) &= -S^{-\tau} \epsilon C (\partial_x S^\tau \phi + S^\tau \partial_x \phi) \\ &\quad - S^{-\tau} \frac{\epsilon^2}{2} (\partial_x^2 S^\tau \phi + 2\partial_x S^\tau \partial_x \phi + S^\tau \partial_x^2 \phi). \end{aligned} \quad (26)$$



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 11 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir

Diagonalizando  $S$  en una matriz  $D$  mediante  $D = XSX^{-1}$ , cambiando variable a  $\eta = X\phi$  y luego a  $\eta = \zeta + \epsilon\rho$ , resulta

$$(\zeta(x, t) - \zeta(x, t - \Delta t)) + \epsilon(\rho(x, t) - \rho(x, t - \Delta t)) = -\epsilon D^{-\tau} X C X^{-1} D^{\tau} \partial_x \zeta - \epsilon^2 \left( D^{-\tau} X C X^{-1} D^{\tau} \partial_x \rho + \frac{1}{2} \hat{1} \partial_x^2 \zeta \right). \quad (27)$$

Realizando análisis multiescala se obtiene ecuación para la primera componente de  $\zeta$

$$\partial_t \zeta_1 = \frac{i}{2m} \partial_x^2 \zeta_1, \quad (28)$$

con  $m = \tan \theta / 2$  cuando se parametrizan  $p = \cos \theta$  y  $q = -i \sin \theta$ . Des haciendo los cambios de variable hasta recuperar  $\psi_i$  y realizando las derivadas involucradas se tiene

$$\partial_t \Psi = -i \left( -\frac{1}{2m} \partial_x^2 + V(x) \right) \Psi \quad (29)$$

que corresponde a la ecuación de Schrödinger 1D dependiente del tiempo.



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 12 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir

### 3. Resultados parciales

#### 3.1. Simulaciones de evolución

Se define estado para  $t = 0$  y se opera sobre él con una matriz que representa la regla de evolución.

#### 3.2. Onda Plana

$$\psi_j(x, 0) = \begin{cases} e^{ikx}, & j = r \\ 0, & j = l \end{cases}$$



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 13 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir

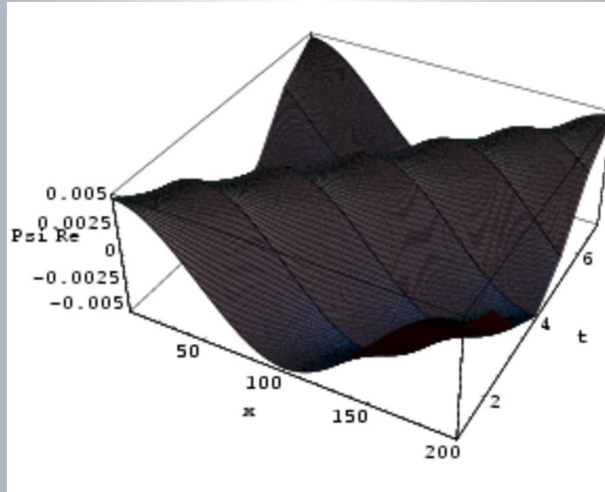


Figura 4: Evolución de onda plana.

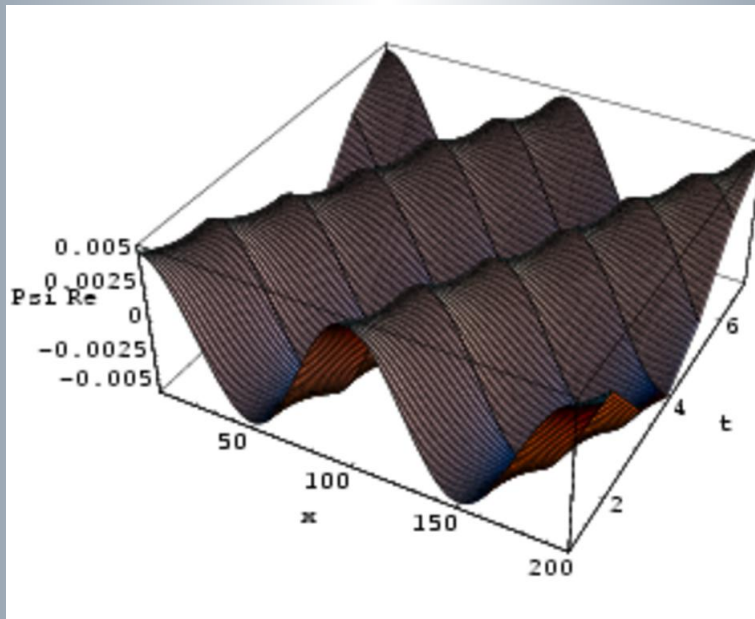


Figura 5: Evolución de onda plana con diferente número de onda.

### 3.3. Paquete gaussiano

$$\psi_j(x, 0) = \begin{cases} \exp ikx - \frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}, & j = r \\ 0, & j = l \end{cases}$$

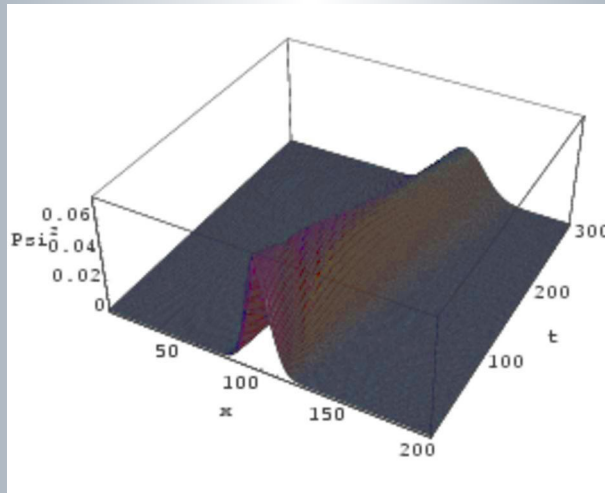


Figura 6: Evolución de un paquete gaussiano con moméntum medio inicial a la derecha



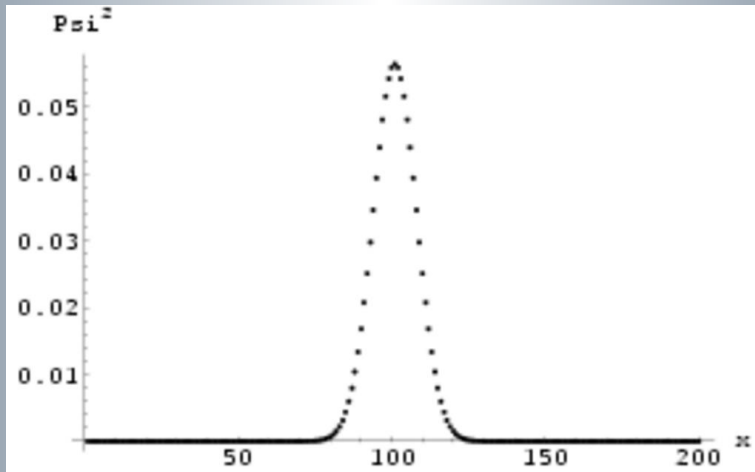


Figura 7: Estado del paquete gaussiano en  $t=0$

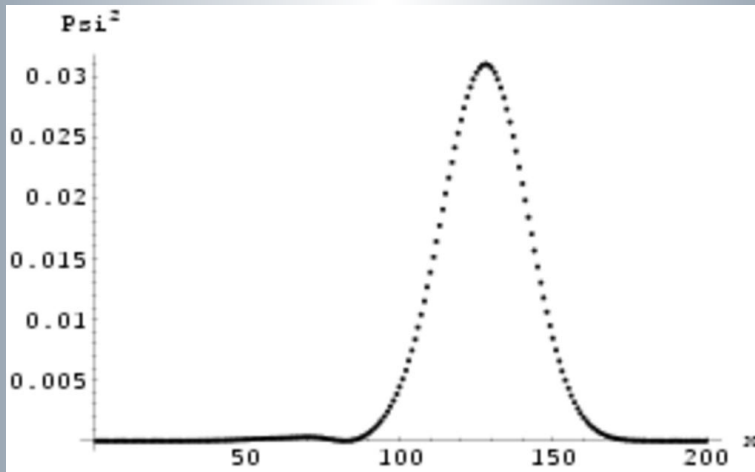


Figura 8: Estado del paquete gaussiano en  $t=300$

$$\psi_j(x, 0) = \begin{cases} \exp -\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}, & j = r \\ 0, & j = l \end{cases}$$

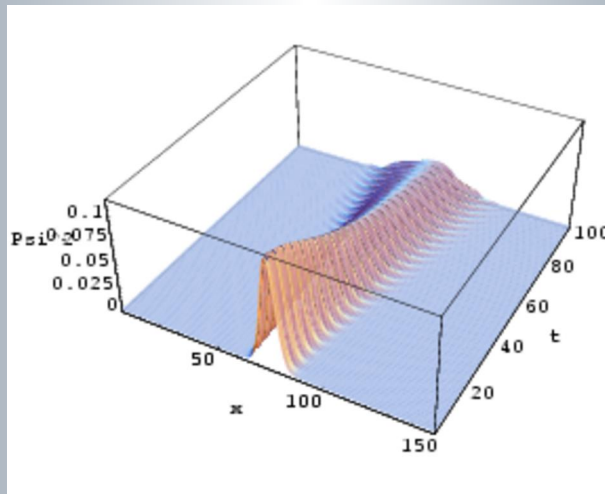


Figura 9: Evolución de un paquete gaussiano con moméntum medio inicial nulo

### 3.4. Autoestados de un pozo de potencial

Representación matricial

$$\begin{pmatrix} \psi_r(0, t) \\ \psi_l(0, t) \\ \psi_r(1, t) \\ \psi_l(1, t) \\ \psi_r(2, t) \\ \psi_l(2, t) \\ \vdots \\ \psi_r(N-1, t) \\ \psi_l(N-1, t) \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} \langle 0, r | \\ \langle 0, l | \\ \langle 1, r | \\ \langle 1, l | \\ \langle 2, r | \\ \langle 2, l | \\ \vdots \\ \langle 3, r | \\ \langle 3, l | \end{matrix} \quad \begin{matrix} t \\ |0, r\rangle & |0, l\rangle & |1, r\rangle & |1, l\rangle & |2, r\rangle & |2, l\rangle & |3, r\rangle & |3, l\rangle \\ p & q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ q & p & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p & q & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q & p & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p & q & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & q & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p & q \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & q & p \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} \langle 0, r | \\ \langle 0, l | \\ \langle 1, r | \\ \langle 1, l | \\ \langle 2, r | \\ \langle 2, l | \\ \langle 3, r | \\ \langle 3, l | \end{matrix} \quad \begin{matrix} t \\ |0, r\rangle & |0, l\rangle & |1, r\rangle & |1, l\rangle & |2, r\rangle & |2, l\rangle & |3, r\rangle & |3, l\rangle \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{matrix}$$

un

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 20 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir

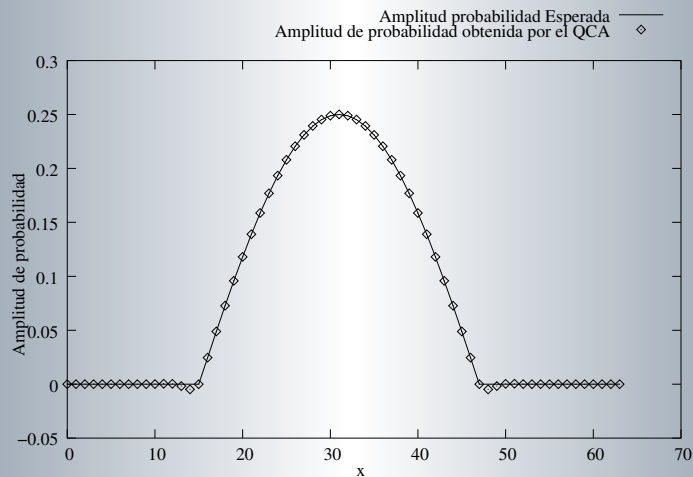


Figura 10: Estado base analítico y obtenido mediante la diagonalización de la matriz de evolución del autómata

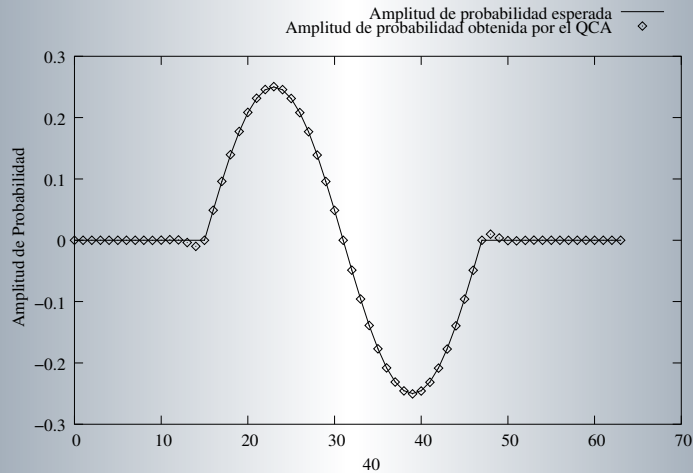


Figura 11: Primer estado excitado analítico y obtenido mediante la diagonalización de la matriz de evolución del autómata

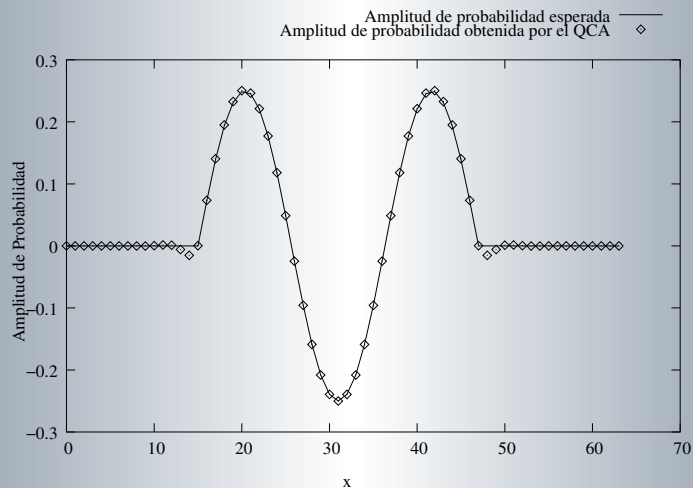


Figura 12: Segundo estado analítico y obtenido mediante la diagonalización de la matriz de evolución del autómata



## Referencias

- [1] B. Chopard y M. Droz, *Cellular Automata Modeling of Physical Systems*, Cambridge University Press (1998).
- [2] R. P. Feynman y A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw Hill (1965).
- [3] S. Fussy y G. Grossing, *Non local computation in Quantum Cellular Automata*, Physical Review A **48** (1993).
- [4] S. Succi y R. Benzi, *Lattice Boltzmann equation for Quantum Mechanics*, Physica D **69** (1993).
- [5] D. P. DiVincenzo, *Science* **270**, 255 (1995).
- [6] A. Ekert y R. Josza, *Review on Modern Physics* **68**, 733 (1996).
- [7] B. M. Boghosian y W. Taylor IV, *Quantum Lattice Gas Models for the Many Body Schrödinger Equation*, International Journal of Modern Physics C **8**, 705 (1997).
- [8] D. A. Meyer, *From Quantum Cellular Automata to Quantum Lattice Gases*, Journal of Statistical Physics **85**, 551 (1996).
- [9] D. A. Meyer, *Quantum mechanics of lattice gas automata: One-particle plane waves and potentials*, Physical Review E **55** 5261 (1997).
- [10] D. A. Meyer, *Quantum Lattice Gases and their Invariants*, International Journal of Modern Physics C **8** (1997).



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 24 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir



- [11] D. A. Meyer, *From Gauge Transformations to Topology Computation in Quantum lattice Gas Automata*, Journal of Physics A **34** (2001).
- [12] T. Toffoli y N. Margolus, *Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling (Scientific Computation)*, MIT Press (1987).



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



Presentación



Página 25 de 26

Pantalla Completa

Cerrar

Salir