Función generatriz para QRW

2020

Abstract

En este artículo proveemos una derivación analítica de las amplitudes de los Random Walk Cuánticos (QRW) -análogos cuánticos de los Random Walk Clásicos (CRW)-, utilizando la técnica de la función generatriz. Estas funciones se obtienen resolviendo las relaciones de recurrencia para las amplitudes, que luego se obtienen como coeficientes del desarrollo de Taylor de la función generatriz. También analizamos la posibilidad de extender las relaciones de recurrencia al caso continuo.

1 QRW en una dimensión

1.1 Introducción.

(Primero intro de lo que voy a hacer)

Vamos a definir el QRW en una dimensión ($1d$): Trabajaremos con el *modelo discreto* en el cual la base del espacio de Hilbert de posiciones es:

$$\mathcal{H}_p = span\left\{|i\rangle : i \in \mathbb{Z}\right\}, \tag{1}$$

donde $|i\rangle$ son los autovectores que forman una base del espacio, y el espacio de Hilbert completo consistirá en el producto tensorial entre el espacio de posiciones y de spines

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_s, \tag{2}$$

donde $\mathcal{H}_s = span\{|+\rangle, |-\rangle\}$, y $|+\rangle$ y $|-\rangle$ son los dos autoestados posibles de quiralidad (ya que dan la componente de spin en la dirección del movimiento).

La idea central del QRW es la siguiente: se comienza con un dado estado de la partícula en el espacio de Hilbert -es decir, una dada posición y un dado spin-, cada paso consiste de la composicion dos operaciones unitarias: la primera consiste en una rotación del spin en un dado ángulo (o bien, la rotación contraria de los estados de base del spin) que sólo actúa en el espacio de spin $\mathcal{H}_s$ de la partícula. La segunda operación unitaria actúa sobre el espacio de Hilbert $\mathcal{H}_p$ de la partícula, efectuando una traslación condicionada según el estado de spin que resultó luego de aplicar la rotación del spin.

Analicemos qué efecto tiene esta sucesión de transformaciones, tomando una rotación de sin footnote spin[1] dada por una transformación particular borrar, solo q hay mas posibilidades-cuya elección justificaremos posteriormente-, llamada *transformación de Hadamard* cuya representación matricial viene dada por:

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} . \tag{3}$$

Si escribimos los vectores de base $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, vemos que la transformación de Hadamard envía los estados de base a los estados (normalizados)

$$\hat{H} |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|+\rangle + |-\rangle \Big) \quad ; \quad \hat{H} |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|+\rangle - |-\rangle \Big) , \tag{4}$$

por lo que podemos reescribir al operador de la siguiente forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|+\rangle + |-\rangle \Big) \langle +| + \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(|+\rangle - |-\rangle \Big) \langle -| . \tag{5}$$

Ahora proponemos una transformación condicional $\hat{T}$ que actúe de manera que

$$\hat{T} |i, +\rangle = |i+1, +\rangle \quad ; \quad \hat{T} |i, -\rangle = |i-1, -\rangle ,$$

numeracion y sangria donde escribimos $|i, -\rangle$ para los productos tensoriales $|i\rangle \otimes |-\rangle$, de manera que si el spin es hacia la derecha en sentido positivo del eje la partícula se traslade hacia la derecha y viceversa hacia la izquierda. Una transformación que cumple dicho requisito es ver + y - vs 0 o 1

$$\hat{T} = \sum_i \; |i+1, +\rangle \langle i, +| + |i-1, -\rangle \langle i, -| , \tag{6}$$

donde la suma se extiende sobre todo i entero y donde hemos usado que ambas bases son ortonormales.

1.2 CRW vs QRW

En contraste con el caso clásico, cuya distribución de valores es simétrica alrededor del origen, el caso cuántico en general tendrá una distribucion asimétrica dependiendo del estado inicial y de la "moneda". resumir

La diferencia central con los CRW es que en los QRW las amplitudes de propagación a lo largo de los distintos caminos interfieren de manera constructiva en algunos lugares y destructivamente en otros, lo cual genera refuerzos o cancelaciones.

[1] Estas transformaciones de spin son también llamadas "monedas", en analogía con el CRW, ya que el spin cumple el rol que cumplía antes la moneda, indicando hacia dónde se desplaza la amplitud de un dado sitio.

Veamos una operación que permite conectar los QRW con los CRW. A medida que el sistema evoluciona, el mismo se va deslocalizando entre los diferentes sitios con una distribución de probabilidad dada por los coeficientes del desarrollo de la función de onda del sistema en la base de posiciones $\{|i\rangle : i \in \mathbb{Z}\}$. Si ahora forzamos la localización del sistema, mediante otra operación, llamada usualmente "medición"[2], el sistema se "reinicia", volviendo a algún (otro) autoestado de la posición. Si esta medición se efectuara en cada paso, se tendría una evolución entre estados equiprobables sin interferencia de amplitudes, con lo cual se recupera el CRW. Un operador de medición M_j que proyecte hacia un autoestado $|j\rangle$ puede escribirse en función de las proyecciones hacia dicho estado, y hacia el espacio ortogonal, de manera que

$$M_j |\psi\rangle = \begin{cases} |j\rangle & \text{con} \quad p_j = |\langle j|\psi\rangle|^2 \\ \\ \dfrac{|\psi\rangle - \langle j|\psi\rangle |j\rangle}{\sqrt{1 - |\langle j|\psi\rangle|^2}} & \text{con} \quad p_j^c = 1 - |\langle j|\psi\rangle|^2 \end{cases}$$

siendo p_j la probabilidad de estar en el autoespacio de $|j\rangle$ y p_j^c la estar en el espacio ortogonal.

Pueden considerarse situaciones intermedias entre el CRW y el QRW, en las cuales se mide la posición cada un cierto número de pasos; esto permite estudiar más detalladamente la transición entre el régimen clásico y el cuántico. Por otro lado también es posible efectuar una medida similar pero en la base de spines (o ambas). Cuando se realizan medidas con cierta frecuencia en cada paso en el espacio de posiciones, se encuentra que el régimen clásico se establece rápidamente, según se observa al evaluar la varianza de la distribución, que rápidamente tiende a la de un CRW. En contraste, cuando se modifica la evolución de los spines utilizando una nueva base de spines cada cierto número de pasos, de modo de eliminar la interferencia entre las coherencias cuánticas de los grados de libertad de spin, el régimen clásico tarda más en manifestarse, apareciendo solo en el límite en el cual el spin se mide en cada paso.

Otra diferencia a notar entre el CRW y el QRW, es que en el QRW la evolución es determinista[3] (siendo las transformaciones unitarias reversibles), a diferencia del CRW en donde el resultado de cada paso es probabilístico. En el QRW la parte estocástica sólo aparece si se hace colapsar el sistema al forzar algún tipo de proyección del vector de estado, pero siempre se obtiene la misma distribución de probabilidad a partir del mismo estado inicial y la misma moneda.

---

[2]Esta terminología es probablemente inadecuada y proviene del hecho de que en una medición de la posición de un sistema cuántico, la interacción del mismo con el instrumento (macroscópico) de medición proyecta (o *colapsa*) al sistema en un autoestado de la base de posiciones; pero la misma proyección se da con una interacción adecuada aunque que no constituya una medición. Sin embargo, utilizaremos la terminología de medición en consonancia con la bibliografía en el tema.

[3]Algunos llaman sólamente QW (Quantum Walks) a los que no incluyen una medición y son por tanto deterministas, y QRW a los que sí; acá lo haremos indistintamente.

1.3 Elección de la moneda y estados iniciales

no hace falta, poner antes ‘prque Hadamard y listoUna transformación unitaria en dos dimensiones se puede escribir de manera general como una matriz de 2×2:

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\rho} & \sqrt{1-\rho}e^{i\theta} \\ \sqrt{1-\rho}e^{i\phi} & -\sqrt{\rho}e^{i(\theta+\phi)} \end{pmatrix}, \tag{7}$$

a menos de una fase global que se puede elegir sin perdida de generalizar haciendo real al primer elemento. La moneda de Hadamard se obtiene con $\rho = \frac{1}{2}$ y $\phi = \theta = 0$, siendo $\rho = \frac{1}{2}$ la elección que corresponde a una moneda no cargada, en el sentido de que al cabo de efectuar la transformación y efectuar una medición del spin, se obtienen $|R\rangle$ y $|L\rangle$ con igual probabilidad. Es posible ver que restringiendo los coeficientes a números reales, se obtiene (en una dimensión) el rango completo de comportamientos posibles con solo tomar diferentes estados iniciales. Imponiendo además que la moneda sea simétrica (no sesgada), $\rho = \frac{1}{2}$, se obtiene la moneda de Hadamard, que es particularmente importante para muchas aplicaciones, notablemente en el algoritmo de Grover y en el algoritmo de Shor.

También se reporta que hay estados iniciales con mayor sesgo que $|R\rangle$ o $|L\rangle$ que producirían un alto grado de asimetría en la distribución de probabilidad, pero al compensar esta asimetría con una fase opuesta entre las componentes de la moneda (que no es el caso de Hadamard), se vuelve a recuperar la simetría de la distribución. Esto muestra que pueden obtenerse distribuciones simétricas tanto por interferencia de caminos como en el primer caso, así como en el segundo caso donde se combinan las distribuciones de probabilidad de componentes ortogonales que son una la imagen especular de la otra.

Con la moneda de Hadamard siempre puede obtenerse una distribución simétrica al promediar sobre los estados iniciales.

1.4 QRW continuo

En el QRW continuo no hace falta el uso de una moneda; la evolución se da enteramente en el espacio (de Hilbert) de posiciones.dejar para el final mejor

Para entender de dónde surge la definición, volvamos a los CRW en un grafo que, como dijimos, están caracterizados por la matriz de transición $M = (M_{ij})$, cuyas entradas dan la probabilidad de ir de la posición i a la posición j. Si

$$p(t) = (p_1(t), p_2(t), ..., p_{|V(t)|}(t)) \tag{8}$$

es la distribución de probabilidad a tiempo t,

$$p_i(t+1) = \sum_j M_{ij} p_j(t) \tag{9}$$

es la distribución en el tiempo $t+1$, o bien,

$$p(t+1) = Mp(t). \tag{10}$$

Para hacer el proceso continuo en el tiempo, se puede fijar una tasa de transición fija, con un parámetro γ independiente del tiempo, y permitir que las transiciones se den en cualquier instante, con γ la probabilidad por unidad de tiempo de una transición.

La evolución temporal estará dada ahora en analogía con la versión continua de los CRW por la ecuación diferencial

$$\frac{dp_i}{dt} = -\sum_j H_{ji} p_j(t), \tag{11}$$

con

$$H_{ij} = \begin{cases} d_j \gamma & i = j \\ \\ -\gamma & i \neq j, \quad (i,j) \in G \\ \\ 0 & i \neq j, \quad (i,j) \notin G \end{cases} \tag{12}$$

el generador de traslaciones infinetesimales del proceso[4]. La solución formal de esta ecuación es $p(t) = e^{-Ht}p(0)$; la idea ahora es identificar H con el Hamiltoniano de la mecánica cuántica que genera la evolución unitaria conocida $U(t) = e^{-iHt}$ (donde hay que agregar un factor i respecto del caso clásico para asegurar la unietariedad.)

[4]Los dos primeros casos se dan si i y j son adyacentes -es decir, si el par (i,j) pertenece al grafo G-, y el tercero en caso contrario.

2 Evolución Temporal del sistema

2.1 Transformada defourier

Definamos el operador evoluciónmotivar: $\hat{U} := \hat{T}\hat{H}$, siendo $\hat{H}$, y $\hat{T}$ los operadores definidos en las mayuscula ecuaciones (4) y (6) respectivamente. sacar la palabara simSimplificando, se tienenumeracion:

$$\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_i \Big(|i+1,+\rangle + |i-1,-\rangle \Big) \langle i,+| + \Big(|i+1,+\rangle - |i-1,-\rangle \Big) \langle i,-|$$

definir F y w

Puesto que F es una transformación lineal unitaria, debe preservar productos escalares, por lo que se tiene que $\langle i| \underset{F}{\longrightarrow} \langle \omega|$, obteniendo así para el operador $\hat{U}_F = F\hat{U}F^\dagger$:

$$\hat{U}_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_\omega e^{-2\pi\imath\omega} |\omega,+\rangle \langle \omega,+| - e^{+2\pi\imath\omega} |\omega,-\rangle \langle \omega,-| +$$

$$+\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_\omega e^{+2\pi\imath\omega} |\omega,-\rangle \langle \omega,+| + e^{-2\pi\imath\omega} |\omega,+\rangle \langle \omega,-| \ .$$

Se desprende de esta definición que $\hat{U}_F$ tiene los mismos autovalores que U y si $|\lambda\rangle$ es un autovector de U entonces $F|\lambda\rangle$ es un autovector de F. En efecto:

$$\hat{U}_F |\lambda\rangle_F = F\hat{U}F^\dagger F|\lambda\rangle = F\hat{U}|\lambda\rangle = \lambda F|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle_F \ .$$

Escribiendo a $\hat{U}_F$ en su forma matricial obtenemos:

$$\hat{U}_F = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-2\pi\imath\omega} & e^{-2\pi\imath\omega} \\ e^{+2\pi\imath\omega} & -e^{+2\pi\imath\omega} \end{pmatrix}$$

En esta base $\hat{U}_F$ es diagonalizable, $\hat{U}_F = S\hat{J}S^{-1}$, con $\hat{J}$ diagonal:

$$\hat{J} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \lambda_\pm = \frac{1}{2x}\big(1 - x^2 \pm \sqrt{1+6x^2+x^4}\big)$$

$$S = \begin{pmatrix} \vec{v}_+ & \vec{v}_- \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \vec{v}_\pm = \begin{pmatrix} 2 + \frac{\lambda_\pm}{x} \\ 1 \end{pmatrix}$$

donde hemos definido $x := e^{2\pi\imath\omega}$. Por tanto tenemos en esta base:

$$\hat{J} = \sum_\omega \lambda_+ |v_+\rangle \langle v_+| + \lambda_- |v_-\rangle \langle v_-|$$

de forma tal que:

$$\hat{J}^n = \sum_\omega \lambda_+^n |v_+\rangle \langle v_+| + \lambda_-^n |v_-\rangle \langle v_-|$$

y por tanto:

$$\hat{U}^n = F^\dagger S\hat{J}^n S^{-1} F$$

2.2 Relación de recurrencia

Partiendo de un estado ψ_0, el sistema evolucionará motivar y decir de donde sale de acuerdo a:

$$\psi_n = \hat{U}^n \psi_0 = \sum_{|i|=0}^{n} a_i^n \left|i,+\right\rangle + b_i^n \left|i,-\right\rangle \ , \tag{13}$$

donde se satisface que:

$$\sum_{|i|=0}^{n} ||a_i^n||^2 + ||b_i^n||^2 = 1$$

Por otro lado:

$$\begin{aligned} \psi_n = \hat{U}\psi_{n-1} = \sum_{|i|=0}^{n-1} a_i^{n-1}\hat{U}\left|i,+\right\rangle + b_i^{n-1}\hat{U}\left|i,-\right\rangle = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{|i|=0}^{n-1} \left(a_i^{n-1} + b_i^{n-1}\right)\left|i+1,+\right\rangle + \left(a_i^{n-1} - b_i^{n-1}\right)\left|i-1,-\right\rangle \end{aligned} \tag{14}$$

Igualando los coeficientes de ambos desarrollos se obtiene la siguiente relacion de recurrencia de dos índices:

$$\begin{cases} \sqrt{2}\, a_i^n = a_{i-1}^{n-1} + b_{i-1}^{n-1} \\ \\ \sqrt{2}\, b_i^n = a_{i+1}^{n-1} - b_{i+1}^{n-1} \end{cases} \tag{15}$$

Haciendo el cambio $a_i^n \to a_i^n/(\sqrt{2})^n$ se tiene:

$$\begin{cases} a_i^n = a_{i-1}^{n-1} + b_{i-1}^{n-1} \\ \\ b_i^n = a_{i+1}^{n-1} - b_{i+1}^{n-1} \end{cases} \tag{16}$$

Despejando de la primera ecuación y reemplazando en la segunda, se obtiene:

$$a_{i+1}^{n+1} - a_i^n - 2a_{i+1}^{n-1} + a_{i+2}^n = 0 \tag{17}$$

La eq. (17) es una relación de recurrencia de orden dos en ambos índices. Para resolverla, es necesario fijar dos condiciones iniciales. De forma general, como cualquier problema de mecánica cuántica descripto por la ecuación de Schöedinger, la evolución del sistema queda determinada por la condición inicial (dada por los coeficientes a_i^0 y b_i^0) y dos condiciones de contorno.

Si escrbimos las relación de recurrencia para los coeficientes b_i^n se tiene:

$$b_{i-1}^{n+1} + b_i^n - 2b_{i-1}^{n-1} - b_{i-2}^n = 0 \tag{18}$$

Un aspecto interesante es que la transformación

$$a^n_{i+\alpha} = (-)^{\alpha+1}\ b^n_{i-\alpha} \tag{19}$$

lleva la eq. (17) a la eq. (18).

No es dificil mostrar que: $\sigma_1 |\pm\rangle = |\mp\rangle$ y que $[\hat{U}, \sigma_1] = 0$. Por tanto,si partimos de un estado inicial up, por ejemplo, $\psi_n = \hat{U}^n \psi_0^+ = \hat{U}^n \sigma_1 \psi_0^- = \hat{U}^n \psi_0^-$

2.2.1 Condiciones iniciales

Spin up: Si partimos de la condición inicial $a^0_0 |0,+\rangle$, tenemos que $a^0_i = \delta_{i0}$ y $b^0_i = 0$, de eq. explicar porque se analiza (16) obtenemos:

$$\begin{cases} a^0_{i+1} = a^{-1}_i + b^{-1}_i = 0 \\ \\ b^0_{i-1} = a^{-1}_i - b^{-1}_i = 0 \end{cases} \tag{20}$$

de donde se concluye que $a^{-1}_i = 0$ para todo $i \neq -1$ y para $i = -1$ se tiene:

$$\begin{cases} a^0_0 = a^{-1}_{-1} + b^{-1}_{-1} = 1 \\ \\ b^0_{-2} = a^{-1}_{-1} - b^{-1}_{-1} = 0 \end{cases} \tag{21}$$

de donde se concluye que $a^{-1}_{-1} = b^{-1}_{-1} = \frac{1}{2}$. Por tanto la condición inicial del programa estará dada por $a^0_0 = 1$ y $a^{-1}_{-1} = \frac{1}{2}$, lo cual debería ser análogo a imponer el valor de a^1_1).

Spin Down: Si partimos de la condición inicial $b^0_0 |0,-\rangle$, tenemos que $a^0_i = 0$ y $b^0_i = \delta_{i0}$. De eq. (16) se tiene para todo $i \neq 0$:

$$\begin{cases} a^0_{i+2} = a^{-1}_{i+1} + b^{-1}_{i+1} = 0 \\ \\ b^0_i = a^{-1}_{i+1} - b^{-1}_{i+1} = 0 \end{cases} \tag{22}$$

de donde se concluye que $a^{-1}_{i+1} = 0$, mientras que para $i = 0$ se tiene:

$$\begin{cases} a^0_2 = a^{-1}_1 + b^{-1}_1 = 0 \\ \\ b^0_0 = a^{-1}_1 - b^{-1}_1 = 1 \end{cases} \tag{23}$$

de donde se concluye que $a^{-1}_1 = \frac{1}{2}$ y $b^{-1}_1 = -\frac{1}{2}$. Por tanto la condición inicial del programa estará dada por: $a^1_1 = 1$ y $a^{-1}_1 = \frac{1}{2}$.

2.2.2 Probabilidad

Deprob de que resolverla la recurrencia (17) se obtendría para cualquier número de pasos n y cualquier posición i de la malla linea la probabilidad de encontrar la partícula con un dado spin. Es decir, el coeficiente de la componente de spin down queda determinado por la diferencia entre los coeficientes futuro (paso n+1) - presente (paso n) de la componente spin up.

La probabilidad de encontrar una partícula en una dada posición i de la malla con cualquier spin, en un dado paso n, viene dado por la expresión:

$$P(n,i) = |a_i^n|^2 + |b_i^n|^2 = |a_{i-1}^{n-1} + b_{i-1}^{n-1}|^2 + |a_{i+1}^{n-1} - b_{i+1}^{n-1}|^2 = \\ = P(n-1,i-1) + P(n-1,i+1) + 2\mathsf{IReal}\left(I(n-1,i)\right) \tag{24}$$

siendo $I(n,i)$ el término de interferencia del paso n y posición i:

$$I(n,i) = a_{i-1}^n \bar{b}_{i-1}^n - a_{i+1}^n \bar{b}_{i+1}^n \tag{25}$$

2.2.3 Inversión temporal

Vamos a extender la relación de recurrencia a índices enteros.

$$\psi_{-n} = U^{-n}\psi_0 \tag{26}$$

Podemos pensar que la relación de recurrencia dada en la eq. (17) define los términos negativos a través de la siguiente relación de recurrencia:

$$a_i^{-n} = \frac{1}{2}\Big(a_i^{-n+2} - a_{i-1}^{-n+1} + a_{i+1}^{-n+1}\Big)\,, \tag{27}$$

de forma tal que un coeficiente en un paso dado queda completamente determinado por los coeficientes de posiciones adyacentes de los pasos posteriores.

2.2.4 Extensión al caso contínuo

La idea sería ver si se puede extender la rr al caso contínuo y estudiar estas soluciones. Para el caso discreto la relación de recurrencia que determina el comportamiento del sistema es la descripta en (17) ó análogamente en la (18). Para el caso contínuo buscamos una función $f_+(x,y)$ tal que para todo x, y satisface:

$$f_+(x+1,y+1) - f_+(x,y) - 2f_+(x+1,y-1) + f_+(x+2,y) = 0 \tag{28}$$

Seguramente también se pueda hallar otra función $f_-(x,y)$

$$f_-(x-1,y+1) + f_-(x,y) - 2f_-(x-1,y-1) - f_-(x-2,y) = 0 \tag{29}$$

De hallarlas ya tendríamos una extensión de la solución discreta al caso contínuo. Luego habría que estudiar que ecuación diferencial satisface esa solución.

3 Función Generatriz

Nos concentraremos en encontrar una soluciónmotivar a:

$$a_{i+1}^{n+1} - a_i^n - 2a_{i+1}^{n-1} + a_{i+2}^n = 0 \tag{30}$$

equivalentemente:

$$a_i^n = a_{i-1}^{n-1} + 2a_i^{n-2} - a_{i+1}^{n-1} \,. \tag{31}$$

Definimos la función generatrizmotivar porque se llama asi:

$$G(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=-n}^{n} a_i^n x^{i+n} y^n = a_0^0 + (a_{-1}^1 + a_0^1 x + a_1^1 x^2) y + \ldots \,, \tag{32}$$

donde se tiene que

$$a_i^n = \frac{1}{(i+n)!n!} \frac{\partial^{i+2n} G(x,y)}{\partial x^{i+n} \partial y^n} \bigg|_{x=0,y=0} \tag{33}$$

Entonces, de (31) se tiene:

$$G(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=-n}^{n} \left(a_{i-1}^{n-1} + 2a_i^{n-2} - a_{i+1}^{n-1} \right) x^{i+n} y^n \,. \tag{34}$$

3.1 Spin up

De donde reconocemos para el caso spin upexplicar que voy a hacer:

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=-n}^{n} a_{i-1}^{n-1} x^{i+n} y^n = \frac{1}{2} + yx^2 G(x,y) \\[2ex] \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=-n}^{n} a_i^{n-2} x^{i+n} y^n = \frac{1}{4} + \frac{y}{2} + x^2 y^2 G(x,y) \\[2ex] \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=-n}^{n} a_{i+1}^{n-1} x^{i+n} y^n = yG(x,y) \end{cases} \tag{35}$$

En efecto:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=-n}^{n} a_{i-1}^{n-1} x^{i+n} y^n &= a_{-1}^{-1} + a_0^0 \, yx^2 + (a_{-1}^1 + a_0^1 x + a_1^1 x^2) y^2 x^2 + \ldots \\ &= \frac{1}{2} + yx^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=-n}^{n} a_i^n x^{i+n} y^n = \frac{1}{2} + yx^2 \, G(x,y) \,, \end{aligned} \tag{36}$$

donde hemos usado que $a_{-1}^{-1} = \frac{1}{2}$ (ver sec. 2.2.1). Luego también identificamos:

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_i^{n-2} x^{i+n} y^n =$$

$$= a_0^{-2} + (a_{-1}^{-1} + a_0^{-1}x + a_1^{-1}x^2)y + a_0^0 x^2y^2 + (a_{-1}^1 + a_0^1 x + a_1^1 x^2)x^2y^3 + ... =$$

$$= \frac{1}{4} + \frac{yx^2}{2} + x^2y^2 \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_i^n x^{i+n} y^n = \frac{1}{4} + \frac{y}{2} + x^2y^2\, G(x,y)\,, \tag{37}$$

donde usamos que $a_0^{-2} = \frac{1}{4}$, $a_{-1}^{-1} = \frac{1}{2}$ y $a_0^{-1} = a_1^{-1} = 0$. En efecto, evaluando eq. (31) en $n = 0$ e $i = 0$ se tiene $1 = \frac{1}{2} + 2a_0^{-2}$ y de ahí el valor de a_0^{-2} .

Por último calculamos:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_{i+1}^{n-1} x^{i+n} y^n &= a_1^{-1} + a_0^0\, y + (a_{-1}^1 + a_0^1 x + a_1^1 x^2)y^2 + ... = \\ &= y \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_i^n x^{i+n} y^n = y\, G(x,y)\,, \end{aligned} \tag{38}$$

donde hemos usado que $a_1^{-1} = 0$ (ver sec. 2.2.1).

Por tanto obtenemos reemplazando endecir como se usa eq. (32):

$$\boxed{G_+(x,y) = \frac{1+y}{1+y-yx^2-2x^2y^2}} \tag{39}$$

3.2 Spin Down

De donde reconocemos para el caso spin down:

$$\begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_{i-1}^{n-1} x^{i+n} y^n = yx^2 G(x,y) \\ \\ \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_i^{n-2} x^{i+n} y^n = \frac{1}{4} + \frac{yx^2}{2} + x^2y^2 G(x,y) \\ \\ \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_{i+1}^{n-1} x^{i+n} y^n = \frac{1}{2} + y\, G(x,y) \end{cases} \tag{40}$$

En efecto:

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_{i-1}^{n-1}x^{i+n}y^n &= a_{-1}^{-1} + (a_{-1}^{1} + a_0^1 x + a_1^1 x^2)y^2x^2 + ... \\ &= yx^2 \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_i^n x^{i+n}y^n = yx^2\, G(x,y)\,,\end{aligned} \tag{41}$$

donde hemos usado que $a_{-1}^{-1} = 0$ y $a_i^0 = 0\ \forall i$ (ver sec. 2.2.1). Luego también identificamos:

$$\begin{aligned}&\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_i^{n-2}x^{i+n}y^n = \\ &= a_0^{-2} + (a_{-1}^{-1} + a_0^{-1}x + a_1^{-1}x^2)y + (a_{-1}^{1} + a_0^1 x + a_1^1 x^2)x^2y^3 + ... = \\ &= \frac{1}{4} + \frac{y}{2} + x^2y^2 \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_i^n x^{i+n}y^n = \frac{1}{4} + \frac{yx^2}{2} + x^2y^2\, G(x,y)\,,\end{aligned} \tag{42}$$

donde usamos que $a_0^{-2} = \frac{1}{4}$, $a_1^{-1} = \frac{1}{2}$ y $a_0^{-1} = a_{-1}^{-1} = 0$. En efecto, evaluando eq. (31) en $n = 0$ e $i = 0$ se tiene $1 = \frac{1}{2} + 2a_0^{-2}$ y de ahí el valor de a_0^{-2} .

Por último calculamos:

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_{i+1}^{n-1}x^{i+n}y^n &= a_1^{-1} + a_0^0\, y + (a_{-1}^{1} + a_0^1 x + a_1^1 x^2)y^2 + ... = \\ &= \frac{1}{2} + y \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=-n}^{n} a_i^n x^{i+n}y^n = \frac{1}{2} + y\, G(x,y)\,,\end{aligned} \tag{43}$$

donde hemos usado que $a_1^{-1} = \frac{1}{2}$ (ver sec. 2.2.1).

Por tanto obtenemos reemplazando en eq. (34):

$$\boxed{G_-(x,y) = \frac{yx^2}{1 + y - yx^2 - 2x^2y^2}} \tag{44}$$

3.3 Condición Inicial Genérica

Partiendo de un estado:

$$\psi_0 = \alpha\,|i,+\rangle + \beta\,|i,-\rangle \tag{45}$$

Es facil mostrar que la función genetratiz viene dada por:

$$\boxed{G(x,y) = \alpha G_+(x,y) + \beta G_-(x,y)}\,, \tag{46}$$

con $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

3.4 Verificación de los resultados

El archivo FuncionGenerratriz.py calcula los coeficientes como derivadas de la función $G(x, y)$. Para ello hemos utilizado el módulo sympy. Dichas operaciones resultan ser ineficientes computacionlmente, pero pudimos corroborar que los primeros 99 términos resultan iguales a los calculados por le programa Recurrencia1d.py que calcula los coeficientes a través de la relación de recurrencia.

4 Desarrollo de la Función Generatriz I.

Definamos:

$$f(x,y) = \frac{1}{1 + y - yx^2 - 2x^2y^2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x^2)\, y^n \tag{47}$$

esperamos que el desarrollo de Taylor de $P_n(x^2)$ conduzca a un polinomio de la forma:

$$P_n(x^2) = \frac{1}{n!}\,\frac{\partial^n}{\partial y^n} f(x,y)\bigg|_{y=0} = \sum_{k=0}^{n} a_{nk} x^{2k}\,, \quad \text{con } a_{nk} = \frac{1}{n!k!}\frac{\partial^k P_n(x^2)}{\partial x^{2k}}\,. \tag{48}$$

Descomponiendo $f(x, y)$ en fracciones simples, dejando x constante, se tiene:

$$\frac{1}{1 + y - yx^2 - 2x^2y^2} = \frac{A}{y - y_+} - \frac{A}{y - y_-}$$

$$\text{con: } y_\pm = \frac{1 - x^2 \mp \sqrt{1 + 6x^2 + x^4}}{4x^2} \quad \text{y} \quad A = \frac{1}{\sqrt{1 + 6x^2 + x^4}}\,.$$

Por tanto, utilizando el desarrollo de la serie geométrica dentro del dominio $D_+ \cap D_-$, con $D_\pm = |y/y_\pm| < 1$, se tiene[5]:

$$f(y) = \sum_{n=0}^{\infty} A\, \frac{y_+^{n+1} - y_-^{n+1}}{(y_- y_+)^{n+1}} y^n$$

donde es posible identificar:

$$\begin{aligned} P_n(x^2) &= 2^{-(n+1)}\, (h_+ - h_-)(x)\,, \quad \text{siendo} \\ h_\pm(x) &= \frac{(-1 + x^2 \pm \sqrt{1 + 6x^2 + x^4})^{n+1}}{\sqrt{1 + 6x^2 + x^4}} \end{aligned} \tag{49}$$

Utilizando el desarrollo binomial para $(h_+ - h_-)(x)$:

$$\frac{(a+b)^{n+1} - (a-b)^{n+1}}{b} = \sum_{k=0}^{n+1} \binom{n+1}{k} a^{n+1-k} b^{k-1} (1 - (-1)^k) \tag{50}$$

[5] Puesto que $y_- \to 1$ y $y_+ \to -\frac{1}{2x^2}$ cuando $x \to 0$ se tiene que $(0, 0) \in D_+ \cap D_-$.

se deduce que los términos no nulos son aquellos en los que se cumple que k es impar. Por tanto,[6] definiendo $m_0 := \lfloor n/2 \rfloor$, podemos reescribir $h_+ - h_-$ como:

$$(h_+ - h_-)(x) = 2 \sum_{m=0}^{m_0} \binom{n+1}{2m+1} (x^2-1)^{n-2m} (1 + 6x^2 + x^4)^m \,. \tag{51}$$

Luego, reescribiendo el polinomio de forma conveniente y utilizando el desarrollo biinomial:

$$(1 + 6x^2 + x^4)^m = ((x^2-1)^2 + 8x^2)^m = \sum_{j=0}^{m} 2^{3j} \binom{m}{j} (x^2-1)^{2(m-j)} x^{2j} \,, \tag{52}$$

se tiene:

$$\begin{aligned} P_n(x^2) &= \sum_{m=0}^{m_0} \sum_{j=0}^{m} 2^{3j-n} \binom{n+1}{2m+1} \binom{m}{j} (x^2-1)^{n-2j} x^{2j} = \\ &= \sum_{m=0}^{m_0} \sum_{j=0}^{m} \sum_{k=0}^{n-2j} (-1)^{n-k} \; 2^{3j-n} \binom{n+1}{2m+1} \binom{m}{j} \binom{n-2j}{k} x^{2j+2k} = \\ &= \sum_{j=0}^{m_0} \sum_{k=0}^{n-2j} c^n_{jk} \; x^{\,2(j+k)} \,, \end{aligned} \tag{53}$$

donde en la última línea hemos usado la siguiente identidad:

$$\sum_{m=0}^{m_0} \sum_{j=0}^{m} b_{mj} = \sum_{j=0}^{m_0} \sum_{m=j}^{m_0} b_{mj} \tag{54}$$

siendo:

$$c^n_{jk} = (-1)^{n-k} \; 2^{3j-n} \binom{n-2j}{k} \sum_{m=j}^{m_0} \binom{n+1}{2m+1} \binom{m}{j} = (-)^{n-k} \; \frac{2^j (n-j)!}{j! k! (n-2j-k)!} \,,$$

donde se usó que si n es par entonces $m_0 = n/2$, en cambio, de ser n impar $m_0 = (n-1)/2$.

Por último, definamos: $\bar{c}^n_{jk} = c^n_{jk} \; \theta\,(n-2j-k)$, siendo $\theta(x)$ la función salto

[6] Si n es par, entonces $m = 0, 1, .., n/2$, en cambio, de ser impar $m = 0, 1, .., (n-1)/2$. Equivalentemente, $m = 0, 1, .., \lfloor n/2 \rfloor \quad \forall n$.

unitario. Por tanto, podemos extender la suma en k de la eq. (53) hasta n:

$$\sum_{j=0}^{m_0}\sum_{k=0}^{n-2j} c^n_{jk}\; x^{\,2(j+k)} = \sum_{j=0}^{m_0}\sum_{k=0}^{n} \bar{c}^n_{jk}\, x^{\,2(j+k)} \underset{(1)}{=} \sum_{j=0}^{m_0}\sum_{l=0}^{m_0+n} \bar{c}^n_{j,l-j}\theta(l-j)\, x^{\,2l} \underset{(2)}{=}$$

$$\sum_{l=0}^{n}\sum_{j=0}^{m_0} \bar{c}^n_{j,l-j}\,\theta(l-j)x^{\,2l} \underset{(3)}{=} \sum_{l=0}^{n}\sum_{j=0}^{j_0} c^n_{j,l-j}x^{\,2l} = \sum_{l=0}^{n} a_{nl}x^{2l}\,. \tag{55}$$

Donde en:

(1) definimos $l := j+k$. Es claro que $0 \leq l \leq m_0+n$. Añadimos una $\theta(l-j)$ para evitar que $k = l-j$ tome valores negativos.

(2) intercambiamos las sumas y usamos que $\theta(n-l-j) = 0$ si $l \geq n$.

(3) definimos $j_0 := min\{m_0, n-l, l\} = min\{n-l, l\}$ y usamos el hecho que $\theta(n-l-j) = 0$ si $j \geq j_0$.

Por tanto, podemos calcular los coeficientes como:

$$a_{nl} = (-)^{n-l} \times \sum_{j=0}^{j_0} \frac{(-2)^j (n-j)!}{j!(l-j)!(n-l-j)!} =$$

$$= (-)^{n-l} \times \Bigg\{ \binom{n}{l}\, {}_2F_1\Big(-l, l-n, -n, 2\Big) - \frac{(-2)^{j_0+1}(n-j_0-1)!}{(j_0+1)!(n-l-j_0-1)!}$$

$${}_3F_2\Big(1, j_0-l+1, j_0+l-n+1; j_0+2, j_0-n+1; 2\Big)\Bigg\}$$

obteniendo así los coeficientes a_{nl}.

Por tanto:

$$G_+(x,y) = \frac{1+y}{1+y-yx^2-2x^2y^2} = (1+y)\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n} a_{nk}\, x^{\,2k}\, y^n =$$

$$a_{00} + \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}\big(a_{nk}+a_{n-1,k}\big)\, x^{\,2k}\, y^n\,. \tag{56}$$

$$G_-(x,y) = \frac{x^2y}{1+y-yx^2-2x^2y^2} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n} a_{nk}\, x^{\,2(k+1)}\, y^{n+1}\,. \tag{57}$$

5 Desarrollo de la Función Generatriz II.

Buscaremos una forma alternativa de derivarla. Partamos de:

$$G_+(x,y) = \frac{1+y}{1+y-yx^2-2x^2y^2} = \frac{1}{1-r} \quad \text{con} \quad r = yx^2\frac{(1+2y)}{1+y} \tag{58}$$

Para un entorno cercano al origen se cumple que $|r|<1$ por lo que podemos utilizar el desarrollo en serie de la geométrica:

$$\begin{aligned} G_+(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty} y^n x^{2n}\left(\frac{1+2y}{1+y}\right)^n &= \sum_{n=0}^{\infty} y^n x^{2n}\left(1+\frac{y}{1+y}\right)^n = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{j=0}^{n}\binom{n}{j}\frac{y^{n+j}x^{2n}}{(1+y)^j} = \\ = \sum_{n=0}^{\infty} x^{2n}y^n + \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{j=1}^{n}(-)^k &\binom{n}{j}\binom{k+j-1}{k} x^{2n}y^{n+k+j}\,, \end{aligned} \tag{59}$$

donde hemos utilizado un desarrollo convergente en $|y|<1$ para la derivada de la serie geométrica:

$$\begin{aligned} \frac{1}{(1+y)^{j+1}} = \frac{(-)^j}{j!}\frac{\partial^j}{\partial y^j}\left(\frac{1}{1+y}\right) &= \sum_{k=j}^{\infty}(-)^{j+k}\binom{k}{k-j}y^{k-j} = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty}(-)^k\binom{k+j}{k}y^k\,. \end{aligned} \tag{60}$$

La eq. (59) es un desarrollo en serie de Taylor de la función $G(x,y)$.

Definimos $m := k+j$, puesto que $1 \le m-k \le n$ se deduce $1+k \le m \le n+k$, de forma tal que la triple serie de la eq. (59) puede reescribirse como:

$$\begin{aligned} &\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{j=1}^{n}(-)^k\binom{n}{j}\binom{k+j-1}{k}x^{2n}y^{n+k+j} = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{m=k+1}^{k+n}(-)^k\binom{n}{m-k}\binom{m-1}{k}x^{2n}y^{n+m}\,, \end{aligned} \tag{61}$$

Por último, definiendo $i := n+m \Rightarrow k+1 \le i$ llegamos a:

$$\begin{aligned} &\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{m=k+1}^{k+n}(-)^k\binom{n}{m-k}\binom{m-1}{k}x^{2n}y^{n+m} = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{i=m+1}^{\infty}\sum_{m=k+1}^{k+n}(-)^k\binom{i-m}{m-k}\binom{m-1}{k}x^{2(i-m)}y^i\,, \end{aligned} \tag{62}$$

resumiendo ambas sumas en una sola expresión encontramos que la función generatriz viene dada por:

$$\boxed{\therefore G_{+}(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} c(n,m) x^{2n} y^{n+m}} \tag{63}$$

donde hemos definido $c(n,0) = 1$ y para todo $m \geq 1$:

$$c(n,m) = \sum_{k=k_0}^{m-1} (-)^k \binom{n}{m-k}\binom{m-1}{k} \tag{64}$$

existiendo una fórmula cerrada para los coeficientes $c(n,i)$, siendo ${}_2F_1(a,b_1,b_2;z)$ es la función hipergeométrica $2-1$.

Escribiendo los coeficientes a_n^m del desarrollo (32) en función de los $c(n,m)$ obtenemos $c(n,m) = a_{n-m}^{n+m}$.

6 Programa

Escribimos un programa Recurrencia1d.py que calcula todos los coeficientes de la relación de recurrencia para un dado paso n. Luego, calcula la probabilidad para cada punto de los primeros n pasos.