

Simulación de Dinámica Cuántica utilizando Lattice Boltzmann

Juan B. Benavides y Juan P. Vanegas

Febrero de 2020

1. Introducción

La mecánica cuántica es una de las ramas de la física más relevantes hoy en día, con un número importante de físicos trabajando en ella. Gracias a ella es posible comprender el funcionamiento de la naturaleza a escalas pequeñas, y con eso, estudiar sistemas cruciales para nosotros, desde cómo funciona el interior de las estrellas, hasta el comportamiento de proteínas esenciales para la vida. Una diferencia crucial entre la descripción clásica del mundo y la cuántica es la falta de determinismo, que obliga a realizar un estudio basado en estadísticas y probabilidades. Es por esto que encontramos elementos como la función de onda, que en sí misma no representa ninguna realidad física, pero al realizar diferentes operaciones sobre ella podemos hallar los valores esperados para diferentes observables.

Debido a la complejidad matemática que trae consigo esta descripción de la realidad, pocos sistemas tienen una solución analítica. Dentro del gran conjunto de sistemas no resueltos a escalas atómicas podría yacer la clave para un entendimiento más profundo de la realidad, por lo que su estudio resulta fundamental. El estudio de estos sistemas utilizando herramientas computacionales introduce una visión totalmente nueva sobre estos, abriendo todo un nuevo paradigma de estudio. Por un lado, permite ver la evolución de estos sistemas más complejos, sin necesidad de solucionar analíticamente las ecuaciones que los describen, permitiendo avanzar en investigaciones claves para el desarrollo de la ciencia. Por otro lado, es posible implementar nuevos algoritmos que incluyan corrección de efectos cuánticos, o incluso, desarrollar algoritmos para computación cuántica.

Dentro de los métodos computacionales para simular sistemas físicos, podemos destacar dos que a primera vista pueden ser apropiados para la simulación de mecánica cuántica: Autómatas Celulares y Lattice Boltzmann. El motivo por el cual destacan se debe a la naturaleza de su estructura: No se basan en comportamientos deterministas de partículas, sino en la evolución de un sistema en la que cada punto del espacio interactúa de acuerdo con alguna regla con sus vecinos, similar a la evolución de los sistemas cuánticos.

1.1. Autómata Celular

El método de autómatas celulares, desarrollado en 1940 por Stanislaw Ulam y John von Neumann, consta en un arreglo de celdas y un conjunto de reglas de evolución, que relacionan el comportamiento de cada celda basado en sus vecinas. Este método resulta especialmente útil para modelar sistemas difusivos, biofísicos, químicos o incluso sistemas computacionales en sí mismo. Dentro de los modelos de autómatas celulares más destacados vale la pena mencionar el juego de la vida de John Conway.

1.2. Lattice Boltzmann

El método de Lattice Boltzmann nace de la dinámica de fluidos y de la ecuación de Boltzmann, que, al ser discretizada, permite obtener una ecuación que depende exclusivamente del comportamiento local del sistema, facilitando su implementación computacional en serie o en paralelo, haciéndolo un método muy eficiente en cuanto a tiempo de cómputo. Para esto partimos primero de una función de parámetros discretos f , que se relaciona con las variables macroscópicas del sistema mediante las relaciones

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, t) &= \sum_i f_i(\mathbf{x}, t) \\ \rho \vec{u}(\mathbf{x}, t) &= \sum_i \vec{v}_i f_i(\mathbf{x}, t)\end{aligned}$$

Donde ρ y \vec{u} son la densidad de masa y el campo de velocidades del fluido (o su equivalente dependiendo del sistema que se simule). Por otro lado, el subíndice i pertenece a un conjunto de direcciones discreto, en las cuales se propaga la información. Al discretizar la ecuación de Boltzmann encontramos que esta función obedece la ecuación

$$f_i(\mathbf{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

En donde se ve la localidad del sistema, dependiendo únicamente de los puntos vecinos y de un operador colisión Ω . Utilizando la aproximación de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK), tenemos que el operador colisión está dado por

$$\Omega_i = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau} \Delta t$$

Donde la función de equilibrio depende del sistema que se quiera modelar, y el tiempo de relajación τ generalmente se toma como $\tau = \Delta t$.

2. Métodos usados para simular Mecánica Cuántica

Se han propuesto diferentes acercamientos a la simulación de dinámica cuántica basados en autómatas celulares y la ecuación de Lattice Boltzmann. El pri-

mero en ser propuesto fue el de Sauro Succi en 1993, basado en las relaciones entre la ecuación de Dirac en su forma Majorana y la ecuación de Lattice Boltzmann para fluidos. Posteriormente, en 1996, David Meyer propone un enfoque diferente, partiendo de la relación entre la ecuación de difusión y la ecuación de Schrödinger para una partícula libre. Basado en esto, busca la regla de evolución temporal de su sistema basado en la imagen de Schrödinger, que plantea que la evolución temporal de un sistema esta dada por

$$|\psi(x, t)\rangle = \hat{U}(t, t=0)|\psi(x, t=0)\rangle \quad (2)$$

Donde $\hat{U}(t, t=0)$ es el operador de evolución temporal, que es unitario, homogéneo y local. Por lo tanto, en una dimensión puede ser escrito como una matriz de la forma

$$\hat{U} = \begin{bmatrix} \ddots & & & & & \\ & a & b & c & & \\ & & d & e & f & \\ & & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

Sin embargo, Meyer demuestra que no es posible construir un autómata celular no trivial, local, homogéneo y unitario en una sola dimensión [2] por lo que relaja la condición de homogeneidad, manteniendo intactas las condiciones de unitariedad y localidad. Esto convierte al operador \hat{U} invariante bajo dos pasos; que quiere decir que $T^{-2}UT^2 = U$, donde T es el operador de traslación espacial.

2.0.1. Autómata Celular

Partiendo de esta redefinición del operador \hat{U} , podemos hallar la regla de evolución del autómata, dada por:

$$\begin{bmatrix} \psi_{t+1}(x-1) \\ \psi_{t+1}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i \sin \theta & \cos \theta \\ \cos \theta & i \sin \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_t(x-1) \\ \psi_t(x) \end{bmatrix} \quad (3)$$

Sin embargo, dado que el operador es invariante bajo dos pasos es necesario dividir la evolución en dos bloques: Colisión iniciando por pares de celdas impares seguido por un paso de advección, y luego colisión de pares de celdas pares para terminar con un último paso de advección. Este modelo garantiza que la evolución del sistema no conste solamente de interacciones entre pares de celdas que no interactúan con las demás, en lo que Meyer denomina el modelo de “checkerboard”.

2.0.2. Lattice Gas

Extendiendo nuestro sistema podemos hallar una analogía con un automata de partículas para difusión, en donde los contenidos de las celdas pasan a representar partículas en sí, en analogía con un gas. Basados de la regla de evolución

para el autómata celular, podemos hallar la regla de evolución para este gas de partículas.

3. Simulación

3.1. Autómata

Usando la regla 3, y tomando un espacio de Hilbert H con una base discreta $|x\rangle$, encontramos las siguientes gráficas bonitas:

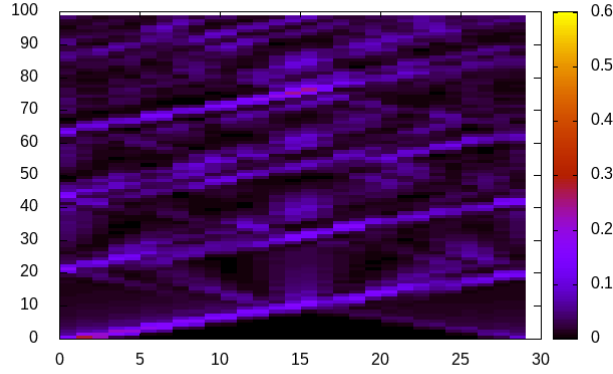


Figura 1: Evolución para una amplitud no nula en $x = 0$

Donde el contenido de la celda representa la probabilidad de encontrar una partícula en esa posición. Vemos que el comportamiento es el esperado, con una difusión progresiva por un lado, y con un movimiento de la amplitud máxima.

3.2. Lattice Gas

A partir de la regla de evolución 3, podemos llegar a una ecuación de la forma

$$\psi_i(x + \vec{v}_i \Delta t, t + \Delta t) = \psi_i(x, t) + (\cos \theta - 1)\psi_i(x, t) + i \sin \theta \psi_i(x + \vec{v}_i \Delta t, t) \quad (4)$$

Vemos que corresponde a la ecuación de Lattice Boltzmann, con un operador de colisión

$$\Omega_i = - \frac{\psi_i(x, t) - \cos \theta \psi_i(x, t) - \sin \theta \psi_i(x + \vec{v}_i \Delta t, t)}{\tau} \Delta t$$

si $\Delta t = \tau$, y por lo tanto una función de equilibrio dada por

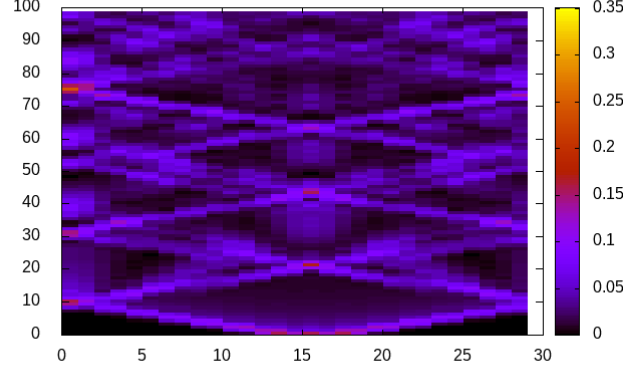


Figura 2: Evolución para una amplitud no nula en $x = 15, 16$

$$f_i^{eq}(x, t) = \cos \theta \psi_i(x, t) + i \sin \theta \psi_i(x + \vec{v}_i \Delta t, t)$$

A partir de esto podemos construir un modelo de Lattice Boltzmann que permita verificar el comportamiento de un sistema cuya solución analítica sea conocida, y validar así el uso de este método para el estudio de la dinámica cuántica. Para este fin tomamos un paquete gaussiano con un momento dado, cuya función de onda está dada por

$$\psi(x, t = 0) = \frac{e^{-ikx}}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right)$$

Donde la masa de la partícula está relacionada con el ángulo mediante $m = \tan \theta$. El comportamiento esperado para un paquete gaussiano con estas características consta de dos partes: Por un lado, esperamos que la media siga un movimiento con velocidad constante, y que la desviación estándar aumente con el cuadrado del tiempo, obedeciendo las relaciones

$$\mu(t) = \mu_0 + (km)t$$

$$\sigma^2(t) = \frac{t^2}{4m^2\sigma_0^2} + \sigma_0^2$$

Para esto tomamos un Lattice de 2048 celdas, iniciando un paquete gaussiano con media $\mu = 1024$ y desviación estándar $\sigma^2 = 50$, una masa de $m = 0,2$ y una velocidad de $v = 0,1$. Los resultados para la evolución de la función de densidad de probabilidad, que de acuerdo a los postulados de la mecánica

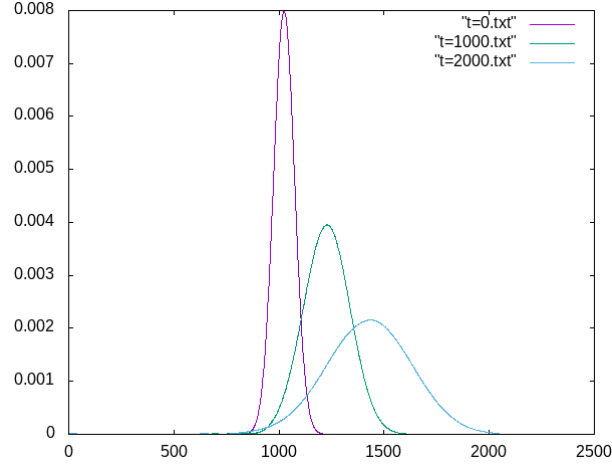


Figura 3: Evolución del paquete gaussiano para $t = 0, 1000, 2000$ pasos de tiempo.

cuántica corresponde a $f_P(x) = |\psi(x)|^2$, y del cambio en la desviación estándar se encuentran en las figuras 3 y 4.

Podemos comprobar que el comportamiento del paquete gaussiano corresponde al esperado, por lo que procedemos a variar la masa de la partícula. Estos resultados se encuentran consignados en la figura 5.

Podemos ver que el comportamiento del paquete gaussiano corresponde al esperado analíticamente, validando así el modelo de Lattice Boltzmann para simular sistemas cuánticos.

4. Conclusiones

- Es posible utilizar métodos computacionales para modelar sistemas cuánticos
- Observamos el comportamiento esperado para el autómata celular
- Vemos que el paquete gaussiano evoluciona de acuerdo a lo predicho
- La desviación estándar crece de forma cuadrática, pero presenta una oscilación, debida posiblemente a errores numéricos o a las aproximaciones realizadas
- Vemos que la forma en la que el paquete gaussiano evoluciona depende de la masa de la partícula

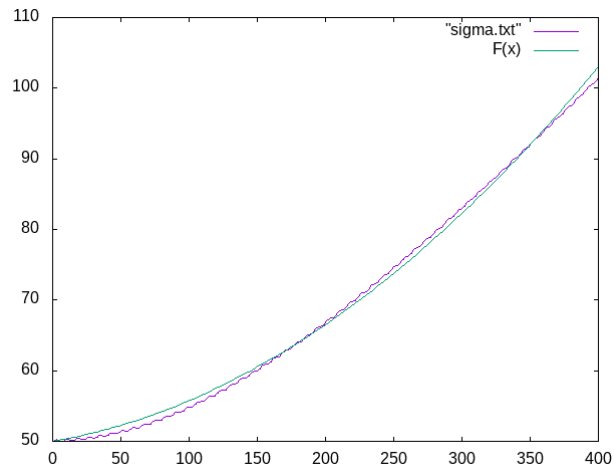


Figura 4: Evolución de la desviación estándar en función del tiempo.

Referencias

- [1] T. et al. Krüger. *The Lattice Boltzmann Method*. Springer, 2017.
- [2] D. Meyer. «From Quantum Cellular Automata to Quantum Lattice Gases». En: *Journal of Statistical Physics* 85 (1996).
- [3] I. Pulido. *Study, implementation and validation of the Lattice Boltzmann method for quantum systems*. Universidad Nacional de Colombia, 2015.
- [4] S. Succi. «Lattice Boltzmann schemes for quantum applications». En: *Computer Physics Communications* 146 (2002).
- [5] M. Valdivieso y J. Muñoz. «Numerical comparison of 1D quantum lattice Boltzmann models». En: *Journal of Statistical Mechanics* (2009).

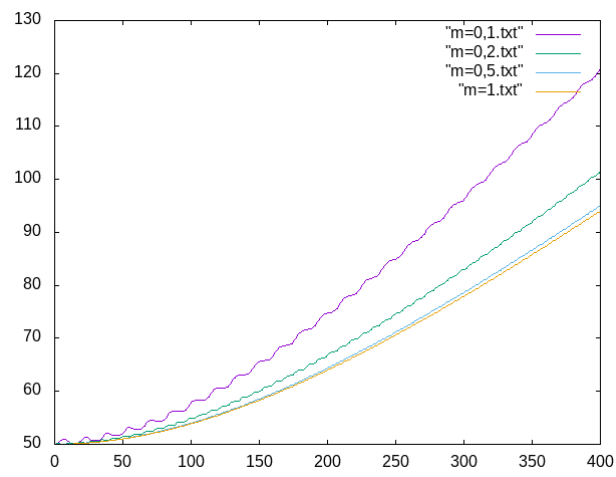


Figura 5: Cambio de la desviación estándar en función del tiempo para diferentes masas.