

شبیه سازی مسئله کاهش پیمایش تصادفی کوانتومی روی یک گراف به پیمایش روی یک خط در حضور مرز جاذب

لاله فرهنگ متین، محمد رضا دوستی

چکیده: پیمایش تصادفی روی یک گراف در علوم متفاوت کاربردهای وسیعی دارد. ما با توضیح چگونگی پیمایش تصادفی برای حالت‌های کلاسیکی و کوانتومی به بررسی تفاوت‌های آن‌ها می‌پردازیم. مسئله‌ی حضور مرزهای جاذب در رئوس گراف را بررسی و به منظور تسریع در حل و کاهش حجم محاسبه، روش کاهش پیمایش روی یک گراف به یک خط را در غیاب و نیز در حضور مرزهای جاذب ارائه می‌نماییم و نشان می‌دهیم که قدرت تسخیر، رفتار دوگانه‌ای را در حالت کوانتومی نشان می‌دهد.

واژه‌های کلیدی: پیمایش تصادفی کوانتومی، محاسبات کوانتومی، گراف، مرز جاذب، کاهش به یک خط

۱- مقدمه

انتقال اطلاعات روی ساختارهای گسسته (شبکه‌ها) که لزوماً شبکه‌های منظمی نمی‌باشند، از مباحث مهم در سال‌های اخیر به شمار می‌رود. مبحث مذکور در بسیاری از رشته‌ها از جمله فیزیک پلیمر، فیزیک حالت جامد، بیوفیزیک، محاسبات کوانتومی و نیز رشته‌هایی نظیر نجوم، شیمی پلیمر، اقتصاد و زیست‌شناسی وارد می‌شود. با بکارگیری مکانیک کوانتومی مشاهده می‌شود که انتقال روی اکثر ساختارها با سرعت بالاتری نسبت به آن‌چه از انتقال کلاسیکی به دست می‌آید، صورت می‌پذیرد. بکارگیری مفهوم پیمایش تصادفی و احتمال و روش‌های آماری در بررسی این فرایندها بسیار کارآمد بوده و نتایج شگفت‌انگیز و قابل توجیحی را در برداشته است.

نظریه‌ها و دیدگاه‌های اخیر در محاسبات کوانتومی، با طرح مشابه‌ای کوانتومی برای پیمایش تصادفی، توانستند به ویژگی‌های کاربردی این نظریه پی ببرند. (به عنوان مثال در طراحی الگوریتم‌های کوانتومی) در این مطالعه‌ها دو نوع پیمایش کوانتومی در نظر گرفته شده؛ ابتدا پیمایش زمان-گسسته توسط واتروس [۴]، آهارانف و همکارانش [۵]، و مور و راسل [۶] بحث گردید و دیگری نیز با عنوان پیمایش زمان-پیوسته که با کارهای فرهی و گوتمن [۷] و چایلد [۸] ارائه شد. تمام این مطالعه‌ها نشان دادند که رفتار پیمایش کوانتومی کاملاً متفاوت با همتای کلاسیکی‌اش می‌باشد. آهارانف، فرهی و گوتمن [۱۰] نشان دادند که پیمایش تصادفی در هر دو حالت ارائه شده زمان-گسسته و پیوسته با سرعت بیشتری نسبت به حالت کلاسیکی اتفاق می‌افتد.

در پیمایش تصادفی زمان گسسته کلاسیکی، در یک بعد، یک متحرک که ما از آن به نام ذره یاد می‌کنیم، برای تعیین جهت حرکت در هر گام به نتیجه پرتاب یک سکه نگاه می‌کند. به عنوان مثال اگر ذره در لحظه اول در مبدأ مختصات باشد، پس از پرتاب سکه

لاله فرهنگ متین: (استادیار)، عضو هیئت علمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شمال، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک، تهران، میدان قدس، خیابان دربند، کوچه‌ی پرتوی،

Laleh.matin@alzahra.ac.ir

محمد رضا دوستی: دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، دانشکده علوم، گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شمال، تهران، میدان قدس، خیابان دربند، کوچه‌ی پرتوی.

اتصال^۱ در رأس i می‌تواند با جمع درایه‌های ماتریس همسایگی محاسبه شود؛

$$z_i = \sum_j A_{ij}$$

که z روی تمام همسایگی‌های رأس i جمع بسته می‌شود و عملگر لاپلاسی به صورت

$$L = Z - A \quad (1)$$

تعریف می‌شود که Z ماتریسی قطری است که به صورت $Z_{ik} = z_i \delta_{ik}$ تعریف می‌شود.

ماتریس لاپلاسی L متقارن است و درآیه‌های آن اعداد معین غیر منفی می‌باشد و بنابراین می‌تواند یک فرآیند مارکف یکانی تولید کند که متضمن بقای احتمال نیز باشد.

به عبارت دیگر، عملگر لاپلاسی می‌تواند به عنوان عملگر انتقال کلاسیکی و نیز هامیلتونی تنگ-بست^۲ برای یک فرآیند انتقال کوانتومی بکار برده شود.

حرکت تصادفی کلاسیکی زمان پیوسته با معادله‌ی مادر^۳ بیان می‌شود:

$$\frac{d}{dt} P_{kj}(t) = \sum_{l=1}^N T_{kl} P_{lj}(t) \quad (2)$$

با فرض این که انتقال بتواند در تمامی زمان‌ها رخ دهد، مفهوم نرخ پرش^۴ را وارد می‌نماییم.

اگر حرکت به صورت متقارن با یک نرخ انتقال γ مستقل از مکان صورت گیرد، ماتریس انتقال T به آسانی به عملگر لاپلاسی مربوط می‌شود:

$$T = -\gamma L$$

$$H_{ij} = \begin{cases} -\gamma & i \neq j \text{ و به یکدیگر متصل اند} \\ 0 & i \neq j \text{ و به یکدیگر متصل نیستند} \\ d_i \gamma & i = j \end{cases} \quad (3)$$

که در آن d_i درجه رأس i است.

اگر نتیجه طرف شیر بود، یک گام به سمت راست و در غیر این صورت یک گام به سمت چپ برخورد داشت. برای یک سکه‌ی سالم (که در آن احتمال شیر یا خط آمدن برابر است)، متوسط جابجایی ذره پس از گام‌های متوالی صفر است و توزیع احتمال در این حالت به صورت استاندارد است و با تابعی گاوسی حول مبدأ نشان داده می‌شود. در پیمایش تصادفی کوانتومی علاوه بر فضای هیلبرت مکان که ذره آن را می‌پیماید، یک فضای سکه نیز تعریف می‌گردد که ویژه حالت‌های آن حالت‌های داخلی ذره می‌باشند. به عنوان مثال برای یک ذره یا اسپین $1/2$ ، دو حالت اسپین بالا و پایین ویژه حالت‌های مذکور هستند. طبق تعریف هر گام پیمایش کوانتومی با دو عملگر به ترتیب در فضاهای و سکه و مکان اتفاق می‌افتد، و در نتیجه یک انحراف در توزیع احتمال کوانتومی در فضای مکان به وجود می‌آید که نتیجه‌ی تداخل در حالت‌ها می‌باشد [۷]. یک نمونه از درستی این نظریه توسط ژانگ [۱۰] و همکارانش در یک کار تجربی نشان داده شد. آن‌ها توانستند به کمک تکانه‌ی زاویه‌ای فوتون و یک شکافنده‌ی پرتو دست ساخت، انحراف در توزیع احتمال کوانتومی را بررسی کنند؛ نتایج آن‌ها تا سه گام نخست قابل تقدیر است.

پیمایش تصادفی پیوسته کاملاً در فضای مکان H_p اتفاق می‌افتد و به فضای سکه نیازی ندارد. رهیافت این مدل بر اساس زنجیره‌های مارکف کلاسیکی زمان پیوسته است. بدین منظور یک گراف با مجموعه رؤس V و مجموعه یال‌های E را در نظر گرفته و حرکت تصادفی کلاسیکی ساده را روی آن تشریح می‌نماییم.

درایه‌های ماتریس همسایگی به صورت

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } (i, j) \in E \\ 0 & \text{سایر شرایط} \end{cases}$$

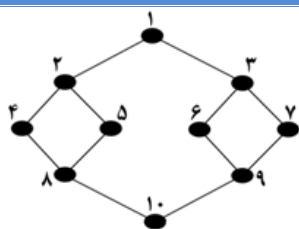
تعریف می‌شوند که در آن E مجموعه‌ی یال‌هاست که عناصر آن به صورت زوج مرتب می‌باشند.

¹ Connectivity

² Tight-Binding

³ Master equation

⁴ Jumping rate



شکل ۱- گراف G_2

۲- پیمایش تصادفی کوانتومی زمان پیوسته

روی یک گراف G_2

ابتدا یک گراف G_2 را در نظر می‌گیریم که متشکل از دو گراف کیلی با دو نسل است که رئوس پایانی‌شان بر یکدیگر منطبق گردیده است (مطابق شکل ۱).

فرض کنید یک ذره روی گراف G_2 شکل ۱، از رأس شماره یک شروع به پیمایش کند. معادلات دیفرانسیل برای پیمایش این ذره طبق رابطه‌های (۲) و (۶) و با استفاده از ماتریس لاگرانژ (۱) به صورت عددی حل، و احتمال در زمان‌های دلخواه ۱ و ۷ و ۱۳ و ۵۰ و ۱۶۰ به کمک نرم افزار MATLAB به صورت شکل (۲) برای هر رأس حاصل می‌گردد.

با شروع پیمایش از رأس شماره ۴ روی گراف G_2 ، مشاهده می‌شود که ذره در این حالت نیز در زمان‌های طولانی، با احتمال زیادتری نسبت به سایر رئوس در رأس آغازی پیمایش می‌باشد. (شکل شماره ۳) نتیجه دیگری که از مقایسه‌ی این دو حالت استنباط می‌شود این است که وقتی ذره از رأس شماره یک شروع به پیمایش تصادفی کوانتومی می‌کند، سریع‌تر به رأس شماره ۱۰ (رأس مقابلش) می‌رسد. فرض کنید ذره کلاسیکی روی گراف G_2 از رأس شماره ۱ شروع به پیمایش می‌نماید. بر اساس شبیه‌سازی انجام شده در شکل (۴) مشاهده می‌شود که پس از گذشت زمان‌های طولانی، احتمال حضور در رئوس به یک تداخل همگن می‌انجامد.

فرض می‌کنیم که یک درخت با v رأس داریم. اگر n تعداد مراحل گام باشد، v ممکن است به بزرگی 2^{n+1} باشد [۸]. رئوس گراف را با اعداد صحیح علامت گذاری می‌نماییم.

$$a = 1, 2, 3, \dots, v$$

و پایه‌های اورتونرمال $\{|i\rangle\}$ را تشکیل می‌دهیم که توابع توزیع احتمال برای هر رأس را می‌دهند. به طوری که

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij} \quad \text{و} \quad i, j \in \{v\}$$

اگر $P_i(t)$ احتمال حضور در رأس i در زمان t باشد، داریم:

$$\frac{d}{dt} P_i(t) = - \sum_j H_{ij} P_j(t) \quad (4)$$

به طوری که $\sum_i P_i(t) = 1$ همواره برقرار است.

در حالت کوانتومی، مشابه حرکت تصادفی کلاسیکی، هامیلتونی سیستم با ماتریس انتقال کلاسیکی مشخص می‌شود:

$$H = -T$$

بقای احتمال از معادله‌ی شرودینگر

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

به دست می‌آید:

$$\sum_a |\langle a | \psi(t) \rangle|^2 = 1$$

و هامیلتونی پیمایش مشابه حالت کلاسیکی تعریف می‌شود.

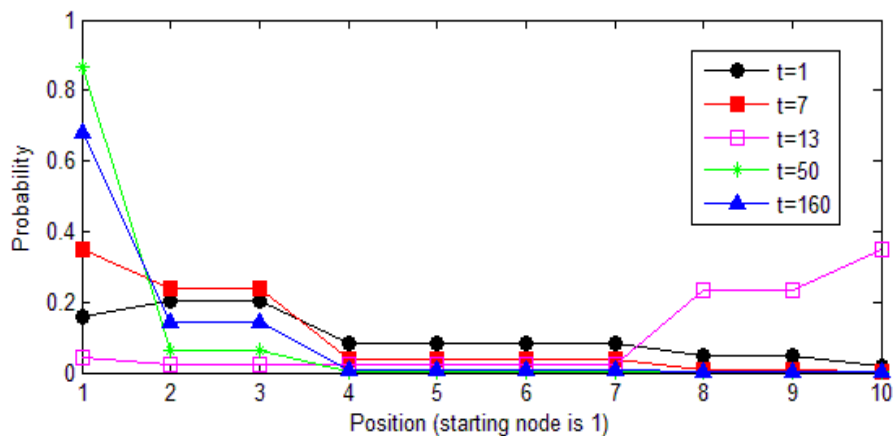
دامنه انتقال $\alpha_{jk}(t)$ از حالت $|k\rangle$ در زمان صفر به حالت $|j\rangle$ در زمان t به صورت

$$\alpha_{jk}(t) = \langle j | e^{-iHt} | k \rangle \quad (5)$$

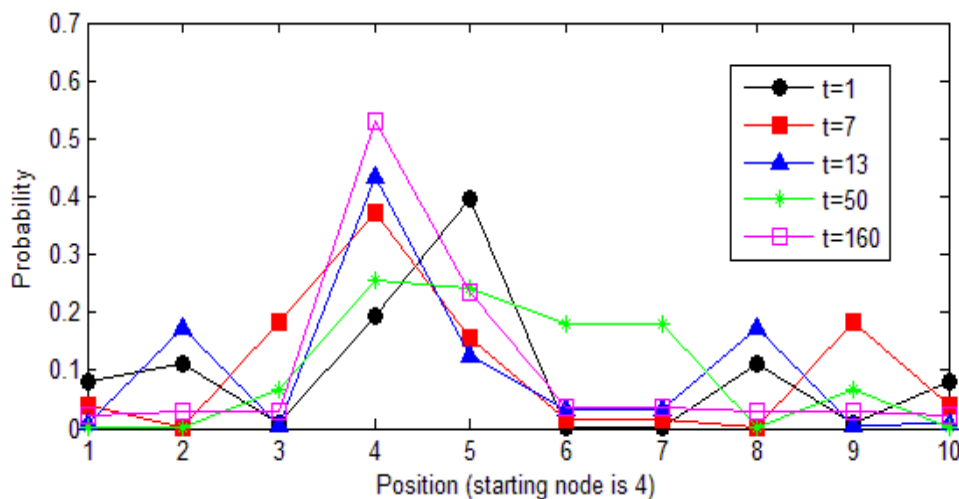
است. که از آن داریم:

$$i \frac{d}{dt} \alpha_{jk}(t) = \sum_l H_{jl} \alpha_{lk}(t) \quad (6)$$

بنابراین بقای احتمال $\sum_j |\alpha_{jk}(t)|^2 = 1$ برای هر زمان t برقرار است.



شکل ۲- توزیع احتمال روی رئوس گراف G_2 وقتی پیمایش از رأس شماره یک آغاز می‌شود. این نمودار نشان می‌دهد که یک حالت کوانتومی با شروع از یک رأس باعث یک اختلال در احتمال حضور بر روی رئوس گراف می‌گردد و پس از گذشت زمان‌های طولانی از شروع پیمایش، ذره با احتمال بسیار زیادی به رأس آغازین برخورد خواهد گشت.



شکل ۳- توزیع احتمال برای پیمایش تصادفی کوانتومی روی رئوس گراف G_2 وقتی پیمایش از رأس شماره‌ی چهار آغاز می‌گردد.

برای هر تابع حل شده از مرتبه 10^{-5} انتخاب گردیده است. $ode45$ عمومی‌ترین حل‌کننده‌ی این نرم افزار می‌باشد که بر اساس فرمول رانج- کوتای (۴و۵) ساده با زوج "دورمند- پرنس" ساخته شده است. این حل‌کننده برای محاسبه‌ی $y(t_n)$ تنها به حل نقطه‌ی قبلی $y(t_{n-1})$ نیاز دارد. در حالت کلی، $ode45$ بهترین تابع و اولین پیشنهاد برای حل عددی اکثر مسائل است [۱۱].

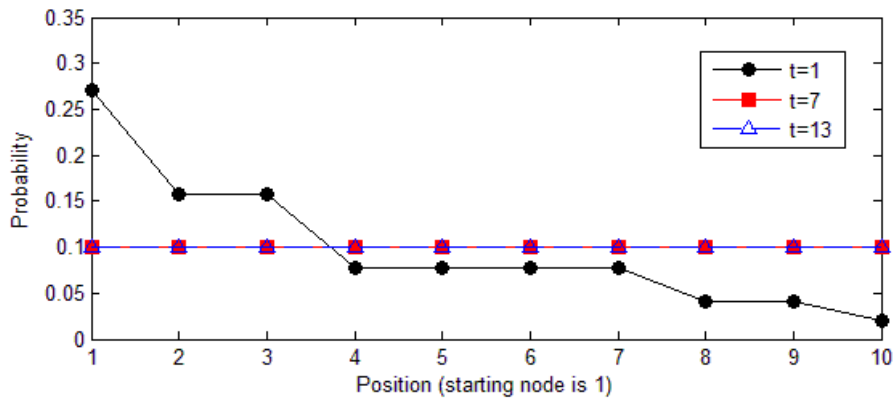
اگر ذره‌ی کلاسیکی را بار دیگر در رأس شماره‌ی چهار قرار دهیم و پیمایش تصادفی را برای آن تکرار کنیم، مشاهده می‌شود که اگرچه در زمان‌های میانی یک توزیع پیچیده در احتمال برای هر رأس به وجود می‌آید، ولیکن در زمان‌های طولانی، مشابه حالت قبل، همه رئوس به یک احتمال یکنواخت همگرا می‌شوند. (شکل شماره ۵) قابل ذکر است که تمام شبیه‌سازی‌ها به کمک نرم افزار MATLAB و توسط حل‌کننده $ode45$ انجام شده که در آن خطا

۳- کاهش پیمایش تصادفی کوانتومی زمان پیوسته روی یک گراف به پیمایش روی یک خط

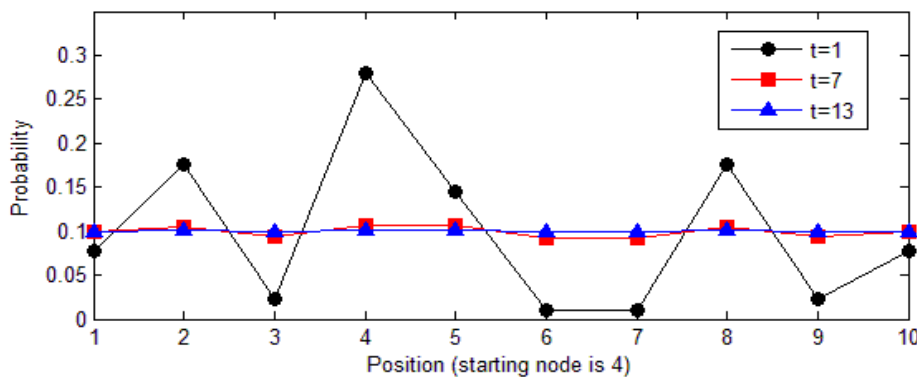
با کمی دقت در پیمایش کوانتومی پیوسته با زمان روی یک گراف G_2 که از بهم پیوستن دو گراف کیلی مطابق شکل ۶ تشکیل یافته، می‌توان دریافت که پیمایش تصادفی کوانتومی وقتی که از رأس شماره ۴ شروع و به رأس شماره ۷ می‌رسد، با حالتی که از رأس شماره ۵ شروع شود و در رأس شماره ۶ خاتمه یابد، یکسان می‌باشد. تقارن گراف باعث می‌شود که بتوان چنین رئوسی را در یک مجموعه (که ما آن‌ها را خوشه می‌نامیم) جمع‌آوری نمود.

برای پیمایش از چپ به راست یا برعکس، مشاهده می‌شود که رئوس ۴ و ۵ متعلق به یک خوشه (خوشه ی اول) هستند.

خوشه‌ی دوم از رئوس ۲ و ۸ که همگی مستقیماً با یک یال به رئوس عضو خوشه اول متصل‌اند، تشکیل یافته و رئوس ۱ و ۱۰ متعلق به خوشه سوم هستند که با یک یال به خوشه دوم متصل‌اند در حالی که همزمان با هیچ یک از رئوس اعضای خوشه اول مجاور نیستند. در حالت کلی هر رأس خوشه $k+1$ ام با یک یال به یکی از رئوس عضو خوشه k ام متصل و همزمان به هیچ یک از رئوس متعلق به خوشه $k-1$ ام متصل نیست.



شکل ۴- توزیع احتمال برای پیمایش تصادفی کلاسیکی روی رئوس گراف G_2 وقتی پیمایش از رأس شماره یک آغاز می‌شود.



شکل ۵- توزیع احتمال برای پیمایش تصادفی کلاسیکی روی رئوس گراف G_2 وقتی پیمایش از رأس شماره چهار آغاز می‌شود.

حالت‌هایی است که رئوس متعلق به یک خوشه می‌باشند.

اکنون به انتقال توسط حالت‌های جدیدی می‌پردازیم که کاملاً متقارن، بهنجار و ترکیبی خطی از

با شرط بهنجارش $\langle C_i | C_i \rangle = 1$ به ازای $i=1,2,3,4,5$ برای مقادیر دامنه‌ها داریم:

$$\alpha = \beta = \delta = \lambda = \eta = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

اگر A ماتریس لاگرانژی انتقال احتمال برای گراف $G2$ باشد و \tilde{A} را ماتریس انتقال احتمال برای پیمایش روی خط منتهی از کاهش گراف بنامیم، داریم:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 3 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 3 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

و با بدست آوردن درایه های ماتریس \tilde{A}

$$\tilde{A}_{11} = \langle C_1 | A | C_1 \rangle = \frac{1}{2}(2+2) = 2$$

$$\tilde{A}_{22} = \langle C_2 | A | C_2 \rangle = \frac{1}{2}(3+3) = 3$$

$$\tilde{A}_{33} = \tilde{A}_{55} = 2$$

$$\tilde{A}_{44} = 3$$

$$\tilde{A}_{12} = \tilde{A}_{21} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 (\langle 2 | A | 4 \rangle + \langle 2 | A | 5 \rangle + \langle 8 | A | 4 \rangle + \langle 8 | A | 5 \rangle) = -1$$

$$\tilde{A}_{13} = \tilde{A}_{31} = 0, \dots$$

$$\tilde{A}_{12} = \tilde{A}_{21} = -1$$

$$\tilde{A}_{43} = \tilde{A}_{34} = 0, \dots$$

$$\tilde{A}_{45} = \tilde{A}_{54} = -1$$

$$|\alpha_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_k}} \sum_{n \in k} |n\rangle \quad (7)$$

که $|n\rangle$ نشان دهنده‌ی حالت رئوسی است که در خوشه k قرار دارند و $|\alpha_k\rangle$ نشان دهنده‌ی حالت این خوشه است. اکنون پیمایش تصادفی کوانتومی پیوسته با زمان با یک هامیلتونی جدید

$$\tilde{H} = \gamma \tilde{A} \quad (8)$$

مشخص می‌شود که عناصر ماتریس \tilde{A} از حالت‌های پایه‌ی جدید $|\alpha_k\rangle$ بدست می‌آیند [۱۲].

$$(9)$$

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

ماتریس \tilde{A} حقیقی است و درآیه‌های روی قطر اصلی و نیز قطرهای فرعی در بالا و پایین قطر اصلی، همواره غیر صفر می‌باشند^۱.

حالت‌های کوانتومی جدید پس از کاهش پیمایش روی گراف $G2$ (شکل شماره ۶) به پیمایش روی یک خط به صورت زیر تعریف می‌شوند:

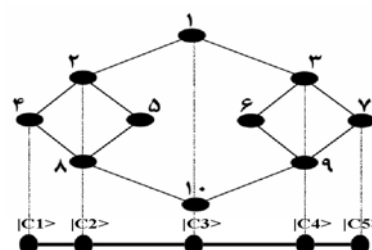
$$|C1\rangle = \alpha(|4\rangle + |5\rangle)$$

$$|C2\rangle = \beta(|2\rangle + |8\rangle)$$

$$|C3\rangle = \delta(|1\rangle + |10\rangle)$$

$$|C4\rangle = \lambda(|3\rangle + |9\rangle)$$

$$|C5\rangle = \eta(|6\rangle + |7\rangle)$$



شکل ۶- نمایش چگونگی خوشه سازی در کاهش پیمایش کوانتومی روی گراف $G2$ به یک خط.

¹ Tridiagonal

حال با به‌کارگیری ماتریس هامیلتونی کاهیده طبق رابطه ۹،

$$\frac{d}{dt}|C_2\rangle = -3i\gamma|C_2\rangle + 2i\gamma|C_1\rangle + i\gamma|C_3\rangle$$

$$\frac{d}{dt}|C_3\rangle = -2i\gamma|C_3\rangle + i\gamma|C_2\rangle + i\gamma|C_4\rangle$$

$$\frac{d}{dt}|C_4\rangle = -3i\gamma|C_4\rangle + i\gamma|C_3\rangle + 2i\gamma|C_5\rangle$$

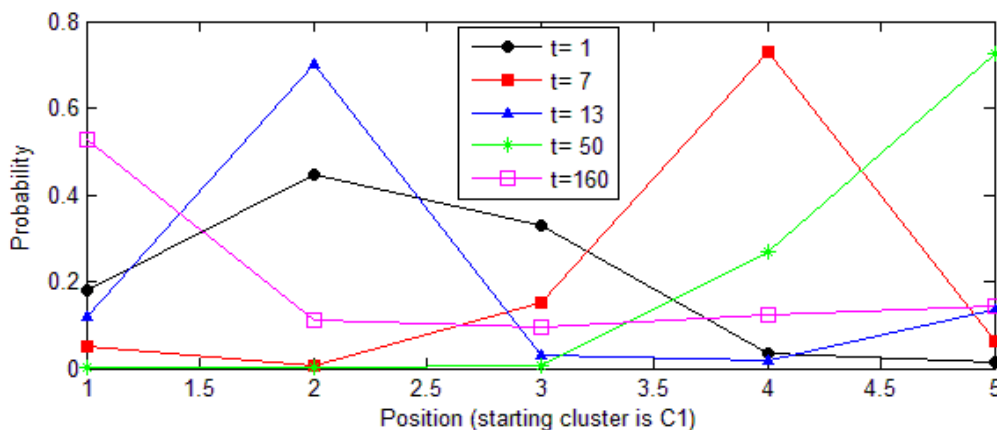
$$\frac{d}{dt}|C_5\rangle = -2i\gamma|C_5\rangle + 2i\gamma|C_4\rangle$$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 3 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}$$

به کمک حل عددی این معادلات توسط نرم افزار MATLAB، چگونگی توزیع احتمال در زمان‌های مختلف برای این پیمایش به دست می‌آید. در این نمودار (شکل ۷) ذره از خوشه شماره یک که شامل رئوس شماره چهار و پنج می‌شود شروع به پیمایش می‌کند.

و اعمال این ماتریس در معادله‌ی تحول زمانی کوانتومی (معادله مادر کوانتومی، (معادله ۶)، به معادلات دیفرانسیل پنج بعدی زیر می‌رسیم.

$$\frac{d}{dt}|C_1\rangle = -2i\gamma|C_1\rangle + 2i\gamma|C_2\rangle$$



شکل ۷- توزیع احتمال در پیمایش تصادفی کوانتومی روی خوشه‌های حاصل از کاهش یک گراف به خط.

نامگذاری می‌نماییم و سیستمی را با N رأس در نظر می‌گیریم که M رأس مرزهای جاذب (تله) می‌باشند و آن‌ها را با m_j که در آن $j = 1, 2, \dots, M$ است، نمادگذاری می‌نماییم.

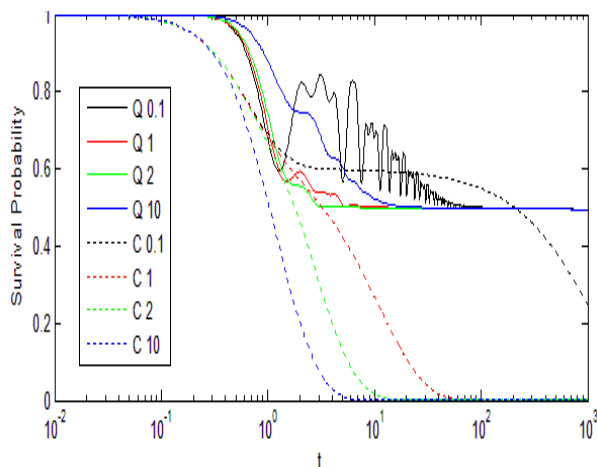
این دستگاه با هامیلتونی موثر غیر هرمیتی $H = H_0 + i\Gamma$ توصیف می‌شود [۴]، که Γ عملگر تسخیر و ماتریسی قطری است.

$$\Gamma = \sum_{j=1}^M \Gamma_{m_j} |m_j\rangle\langle m_j|$$

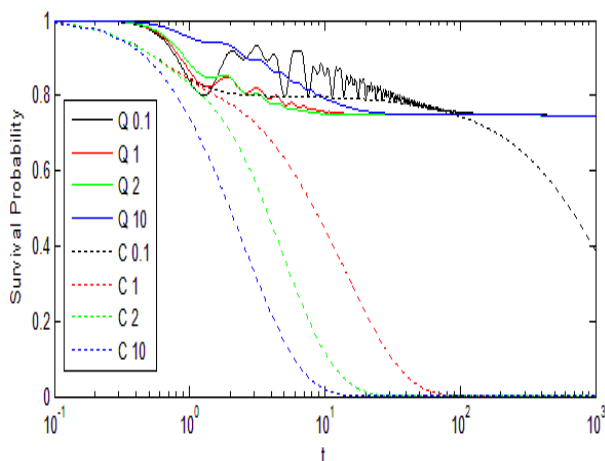
۴- پیمایش تصادفی زمان پیوسته در حضور مرز جاذب

در ادامه قصد داریم به بررسی پیمایش پیوسته با زمان در حضور مرزهایی که کاملاً جاذب نیستند و ذره پس از حضور در آن‌ها با احتمالی هر چند ناچیز فرار خواهد نمود، پردازیم. عملگرهای توصیف کننده-ی پیمایش در اینجا همان عملگرهای بکاربرده شده در پیمایش تصادفی پیوسته با زمان کلاسیکی و کوانتومی می‌باشند. عملگرهای تحول در غیاب تله را با T_0 و H_0 برای حالت‌های کوانتومی و کلاسیکی

احتمال به صورت شکل ۸ و برای پیمایش از رأس آغازین ۴ با مرزهایی در ۱ و ۱۰ به صورت شکل (۹) است.



شکل ۸- احتمال نجات برای پیمایش تصادفی کلاسیکی و کوانتومی روی گراف G_2 وقتی پیمایش از رأس شماره ۱ یک آغاز می شود و مرزها در رئوس ۴ و ۵ و ۶ و ۷ قرار دارند. حالت‌های کوانتومی با خطوط توپر و حالت‌های کلاسیکی با نقطه چین نمایش داده شده‌اند. بزرگی قدرت به عنوان یک پارامتر متغیر در راهنمای نمودار آورده شده است.



شکل ۹- احتمال نجات برای پیمایش تصادفی کلاسیکی و کوانتومی روی گراف G_2 وقتی پیمایش از رأس شماره ۱ چهار آغاز می شود و مرزها در رئوس ۱ و ۷ قرار دارند. حالت‌های کوانتومی با خطوط توپر و حالت‌های کلاسیکی با نقطه چین نمایش داده شده‌اند.

Γ_{m_j} قدرت تسخیر^۱ نامیده می شود و نرخ نابودی یک ذره که در مکان m_j به دام افتاده را مشخص می کند. در اکثر مسایل می توانیم به ازای همه j ها فرض کنیم $\Gamma_{m_j} = \Gamma > 0$ و $\Gamma \rightarrow \infty$ به معنای جذب کامل و آنی یک ذره کلاسیکی است و به یک تله کاملاً جاذب اشاره دارد [۵]. حل تحلیلی این مسئله با تعیین ویژه مقادیر و ویژه توابع ماتریس H به عنوان یک عملگر موثر امکان پذیر است. اگر ویژه مقادیر مختلط H را با $E_l = \varepsilon_l - i\delta_l$ و ویژه توابع آن را با توابع بهنجار دو به دو متعامد^۲ $|\phi_l\rangle$ نشان دهیم به طوری که

$$\langle \tilde{\phi}_l | \phi_{l'} \rangle = \delta_{l,l'} \quad (l=1, \dots, N)$$

$$\sum_{l=1}^N |\phi_l\rangle \langle \tilde{\phi}_l| = 1$$

آنگاه احتمال انتقال بین هر دو رأس دلخواه

$$\alpha_{k,j}(t) = \sum_{l=1}^N e^{-(\delta_l + i\varepsilon_l)t} \langle k | \phi_l \rangle \langle \tilde{\phi}_l | j \rangle$$

و احتمال کوانتومی به صورت

$$\pi_{k,j}(t) = |\alpha_{k,j}(t)|^2$$

می باشد. احتمال جذب توسط رئوس جاذب در هر زمان دلخواه از رابطه $\sum_{k \in M} \sum_{j \in M} \pi_{k,j}(t)$ به دست می آید.

برای زمان‌های طولانی و برای $M \ll N$ ، تقریب مناسبی برای میانگین احتمال نجات^۳ به صورت جمله‌های نمایی میرا شونده به دست می آید [۵].

$$\Pi_M = \frac{1}{N-M} \sum_{l=1}^N e^{-2\delta_l t}$$

با در نظر گرفتن پیمایش تصادفی روی گراف G_2 در حالی که پیمایش از رأس شماره ۱ شروع شود و رئوس ۴ و ۵ و ۶ و ۷ خاصیت جذبی دارند، توزیع

¹ Capture strength

² Biorthonormal

³ Mean survival probability

$$H = \begin{bmatrix} 2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 3 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 2-i\Gamma & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 2 \end{bmatrix}$$

نتیجه می‌گردد. همان گونه که انتظار می‌رود پس از شبیه‌سازی نموداری مشابه شکل ۸ حاصل می‌گردد. برای پیمایش از رأس شماره ۱ و با حضور مرزهایی در ۴ و ۵ و ۶ و ۷، نیز نتایجی مشابه شکل ۹ به دست می‌آید که بدیهی است، زیرا روش‌های متفاوت نباید بر فیزیک مسئله تاثیر گذار باشند. بنابراین روش کاهش پیمایش روی یک خط نمای درستی از پیمایش روی درخت‌های کیلی بهم پیوسته ارائه می‌دهد که باعث کمتر شدن حجم محاسبات، بالا رفتن سرعت و دقت محاسبات می‌گردد.

۶- نتایج

در پیمایش تصادفی روی یک گراف دیدیم که در حالت کلاسیکی با گذشت زمان‌های طولانی، یک اختلاط همگن (یکنواخت) در توزیع احتمال به وجود می‌آید. در حالی که در حالت کوانتومی ذره با احتمال قابل توجهی به رأس آغازین بازخواهد گشت. به کمک تقارن در مسئله‌ی پیمایش تصادفی روی یک گراف، می‌توان آن را به پیمایش روی یک خط - با حالت‌های کمتر- کاهش داد که موجب تسریع حل و کاهش حجم محاسبات می‌گردد. به علت کاربردی بودن وجود تله یا همان مرزها در پیمایش تصادفی روی یک گراف، با بررسی آن دیدیم که چگونه در حالت کوانتومی تداخل باعث فرار بیشتر ذره از مرزها می‌گردد. در حالی که ذره کلاسیکی بسیار سریع‌تر کاملا جذب می‌شود، ذره کوانتومی با احتمال بالایی در جایی غیر از تله می‌باشد. قدرت تسخیر در حالت کوانتومی برخلاف حالت کلاسیکی - که باعث تسریع در به دام افتادن ذره می‌شود- رفتاری دوگانه دارد و همواره افزایش بزرگی قدرت تسخیر سبب تسخیر

در این دو شکل خطوط توپر برای نمایش حالت‌های کوانتومی به کار برده شده و منحنی‌های خط‌چین نمایش‌گر حالت‌های کلاسیکی می‌باشند که به ترتیب با حروف Q و C معرفی می‌شوند. اعداد یاد شده در مقابل هر یک از حروف بیان‌گر شدت پارامتر قدرت می‌باشند. آن چه از این دو نمودار نتیجه‌گیری می‌شود این است که احتمال فرار در حالت کلاسیکی در همان زمان‌های آغازین به صفر همگرا می‌شود در حالیکه در حالت کوانتومی برای زمان‌های بسیار بیشتر از 10^3 احتمال نجات قابل توجهی خواهیم داشت. در هر دو پیمایش شیب افت نمودار احتمال نجات برای حالت کلاسیکی با افزایش قدرت تسخیر افزایش می‌یابد، در حالی که این خصیصه برای حالت کوانتومی دارای یک ویژگی دوگانه می‌باشد. شیب افت احتمال نجات در این حالت ابتدا با افزایش قدرت تسخیر در بازه $(0 < \Gamma \leq 2)$ افزایش و سپس برای $(\Gamma > 2)$ کاهش می‌یابد.

۵- کاهش در پیمایش تصادفی در حضور

مرزهای جاذب بر روی یک گراف G2

پیمایش‌های تصادفی کلاسیکی و کوانتومی روی یک گراف G2 وقتی از رأس شماره ۴ آغاز شود و مرزها ۱ و ۱۰ باشند را به کمک آن چه پیش‌تر توضیح داده شد، می‌توان به پیمایش روی یک خط کاهش داد. هامیلتونی موثر آن به صورت زیر است:

$$H_{eff} = \begin{bmatrix} 2-i\Gamma & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 3 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 3 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 3 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 2-i\Gamma \end{bmatrix}$$

و هامیلتونی کاهش یافته آن به صورت زیر

تحقیق و مشاهده کردیم که احتمال نجات با نتایج قبلی یکسان است.

بیشتر نمی‌شود. در انتها به منظور ارائه کاربردی مسئله کاهش پیمایش تصادفی روی یک گراف متقارن به پیمایش روی یک خط، مسئله وجود مرز را

مراجع

- [1] Aharonov D., Ambainis A., Kempe J. and Vazirani U. in Proceedings of the 33th STOC New York 50, 2001.
- [2] Farhi E. and Gutmann S., *Quantum computation and decision trees*. Phys. Rev. A, 58, 1998, pp.915–928.
- [3] Childs A., Farhi E., and Gutmann S., *An example of the difference between quantum and classical random walks*. Quantum Information Processing, 1, 2002, pp.35.
- [4] Childs A. M., Farhi E. And Gutmann S., *An Example of the Difference Between Quantum And Classical Random Walks*. quant-ph/0103020 v1, 2001.
- [5] Agliari El., Mulken O. and Blumen A., *Continuous-Time Quantum Walks and Trapping*. quant-ph/0903.3288 v1, 2009.
- [6] Kempe J., *Quantum Random Walks - An Introductory Overview*. quant-ph/0303081 v1, 2003.
- [7] Kempe J., Contemporary Physics, 44, 2003, pp. 307.
- [8] Mulken O. And Blumen A., *Slow Transport by Continuous Time Quantum Walks*. quant-ph/0410273 v1, 2004.
- [9] Mulken O., Blumen A., Amthor T., Giese C., Lamour M., and Weidemuller M., *Survival Probabilities in Coherent Exciton Transfer with Trapping*. quant-ph/07053700 v2, 2007.
- [10] Zhang P., Ren X., Zou X., Liu B., Hung Y. and Guo G., *Demonstration of one-dimensional quantum random walk using orbital angular momentum of photons*. Phys. Rev. A 75, 2007.
- [11] MATLAB Function Reference. (2001, June). Retrieved from MATLAB® The Language of Technical Computing: www.mathworks.com
- [12] Watrous J. H., *Quantum simulations of classical random walks and undirected graph connectivity*. Journal of Computer and System Sciences, 62(2), 2001, pp. 376–391. Preliminary version appeared in Proceedings of the 14th Annual IEEE Conference on Computational Complexity, 1999, pp. 180–187.