Ю. И. Ожигов

КОНСТРУКТИВНАЯ ФИЗИКА

R&C Dynamics

Ю. И. Ожигов

КОНСТРУКТИВНАЯ ФИЗИКА

Москва ♦ Ижевск

2010

УДК 530.145
ББК 22.314
О-452

Написание этой книги поддержано грантом компьютерной компании НИКС #F793/8-05.

Ожигов Ю. И.
Конструктивная физика. — М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010. — 424 с.

Конструктивизм — это особый вид математики, который основан на алгоритмических процедурах, а не на абстрактно понимаемых множествах и числах. Физический конструктивизм в его законченной форме представляет собой пока гипотетический программный комплекс, вмещающий в себя все естествознание. В этой книге объясняются основные положения физического конструктивизма и его особая роль для будущего теоретической физики. Конструктивная форма физики необходима для того, чтобы ее методы можно было применять к сложным системам, которые формально принадлежат к химии и биологии. В книге описана конкретная эвристика для построения моделей конструктивной квантовой физики — метод коллективного поведения. Излагается конструктивный подход к квантовому компьютеру как к модельному объекту многочастичной квантовой теории и практические соображения, касающиеся его построения. В силу известной инерции системы образования конструктивные методы в математике остаются неизвестными широкой физической общественности, и я надеюсь, что эта книга стимулирует интерес читателя к тем новым возможностям, которые они открывают. Эти возможности представляют большой интерес как для представителей естественных дисциплин, так и для программистов.

Книга является не окончательным ответом на вопрос о том, что такое конструктивная физика, а скорее манифестом, призывающим к практическим действиям в данном направлении. Я обращаю этот призыв ко всем энтузиастам науки, независимо от их возраста. Для участия в создании конструктивной физики фактически необходимо лишь умение программировать и любовь к изучению Природы. Для понимания содержания достаточно знания математики и физики в объеме первых двух курсов естественных или технических специальностей университетов или технических вузов.

ISBN 978-5-93972-836-2 **ББК 22.314**

© Ю. И. Ожигов, 2010
© НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010

http://shop.rcd.ru
http://ics.org.ru

Я посвящаю эту книгу моим учителям

Оглавление

Предисловие 9

Введение 12
1. Алгоритмы и будущее физики 12
2. Конструктивизм и его роль в квантовой теории 19
3. Мое видение истории конструктивизма 21
4. Краткий обзор содержания 23

Глава 1. **Моделирование динамических сценариев** 27
1.1. Что означает моделирование процессов 28
1.2. Визуализация и роль пользователя 34
1.3. Эволюционный принцип в моделировании динамики 38
1.3.1. Задача Коши 40
1.3.2. В каких случаях нужно эволюционное моделирование 41
1.4. Резюме моделирования динамических сценариев 44

Глава 2. **Конструктивная математика** 46
2.1. Алгоритмы и вычислимые функции 52
2.2. Тезис Тьюринга – Черча – Маркова 55
2.2.1. Вычисления с оракулом 59
2.3. Конструктивная математическая логика и квантовая теория . 62
2.3.1. Стандартная математическая логика 62
2.3.2. Проблема непротиворечивости логических теорий . . 65
2.3.3. Конструктивная математическая логика 66
2.3.4. Идея плюрализма и ее значение для физики 69
2.4. Конструктивный математический анализ 72
2.4.1. Конструктивные вещественные числа 72
2.4.2. Конструктивные функции конструктивного вещественного переменного 74
2.5. Конструктивная алгебра для квантовой механики 79
2.5.1. Алгебраический аппарат квантовой теории 79
2.5.2. Конструктивные алгебраические системы 83
2.5.3. Резюме математического конструктивизма 84

ГЛАВА 3. **Модели, основанные на классической физике** 86
3.1. Частицы и элементарные взаимодействия 86
3.2. Дифференциальные уравнения 90
3.2.1. Модель теплопроводности и колебаний 91
3.2.2. Об уравнении Навье–Стокса 93
3.3. О масштабируемости классических моделей 94
3.3.1. Конструктивизм и границы применимости классических моделей 97

ГЛАВА 4. **Квантовые процессы** 100
4.1. Основные положения одночастичной квантовой механики . . 100
4.1.1. Пример эвристики: серия Бальмера для атома водорода 105
4.1.2. Кубитовый формализм 106
4.1.3. Тензорные произведения 112
4.2. Фейнмановские интегралы по путям 113
4.3. Формализм многочастичной нерелятивистской квантовой теории 121
4.4. Унитарная динамика и измерения 124
4.5. Многомировая картина квантовой теории 127
4.6. Квантовый компьютер 129
4.6.1. Идея квантового компьютера 130
4.6.2. Абстрактная модель квантового компьютера 132
4.7. Роль запутанности 135
4.8. Формализм квантовой электродинамики в кубитовой форме . 137
4.8.1. Резюме стандартного формализма КЭД 144
4.8.2. Моделирование квантовых систем 145
4.8.3. Ансамбли идентичных фермионов и бозонов 150
4.8.4. Спиновые и пространственные координаты 152
4.9. Проблема декогерентности или почему необходим пересмотр оснований квантовой теории многочастичных систем . 154
4.10. Резюме стандартной квантовой механики 159

ГЛАВА 5. **Алгоритмическая модификация квантовой теории** . . 162
5.1. О физическом смысле алгебраических операций 165
5.2. Кванты амплитуды и правило Борна 169
5.3. Абсолютная модель декогерентности 172
5.4. Метод коллективного поведения 175
5.4.1. Что такое конструктивизм на деле 176
5.4.2. Постановка задачи 180
5.4.3. Метод Монте-Карло 183

5.4.4. Приближения уравнения Шредингера квазиклассическими ансамблями: метод Бома 185
5.5. Квантовый рой 187
5.5.1. Зависимость квантовой динамики от зерна 194
5.5.2. Механизм изменения скорости 196
5.5.3. Восстановление волновой функции по динамическому диффузионному рою 197
5.5.4. Алгоритм, моделирующий динамический диффузионный рой 200
5.6. Обсуждение 205
5.6.1. Метод коллективного поведения для многих частиц . . 209
5.6.2. О преимуществах метода динамической диффузии . . 214
5.7. Селекция квантовых состояний при моделировании многочастичной динамики 218
5.7.1. Эффективный алгоритм селекции состояний для n частиц 224
5.8. Идентичность электронов с точки зрения коллективного поведения 228
5.9. Метод коллективного поведения для квантовой электродинамики 231
5.9.1. Роевое представление для заряженных частиц в электромагнитном поле 232
5.9.2. Роевое описание фундаментальных процессов КЭД . . 234
5.9.3. Процедура отбора квантовых многочастичных состояний с учетом фотонов 237
5.9.4. О масштабируемости КЭД 238
5.10. Связи между экземплярами 239
5.10.1. Связи для одной реальной частицы 240
5.10.2. Связи для нескольких частиц. Упорядоченность квантовых «миров» 241
5.11. Эвристика коллективного поведения 245
5.11.1. Краткое резюме 245
5.12. Некоторые примеры 246
5.13. Собственные векторы оператора эволюции и измерение . . . 253
5.14. Изменение сети во времени 255
5.14.1. Указатели 259
5.14.2. Разделение пространственных и спиновых переменных 261
5.14.3. Связи как инструмент масштабирования модели 264
5.15. Реакция ассоциации двух атомов 266
5.15.1. Описание в стандартном формализме 266

5.15.2. Общая методология коллективного поведения 270
5.15.3. Как практически строить модель ассоциации 273
5.15.4. Конструктивная трактовка соотношения неопределенностей 278
5.16. Особенности описания КЭД с помощью сети 279
5.16.1. Связь фотонов с запутанностью 279
5.16.2. Фотонные нити 284
5.17. Краткий обзор приложений метода коллективного поведения 286
5.18. Проблема необратимости времени и связь с гравитацией . . . 297

ГЛАВА 6. **Квантовая нелокальность и элементарные события** . . 301
6.1. Конструктивный взгляд на квантовый компьютер 311
6.2. Черный ход в квантовой информатике 321
6.2.1. Конструктивная трактовка задачи перебора 322
6.2.2. Влияние физического конструктивизма на квантовую криптографию 326
6.3. Резюме конструктивной модификации квантовой теории . . . 331

ГЛАВА 7. **Программный контейнер естествознания** 334
7.1. Актуальность ПКЕ 334
7.1.1. О неудовлетворительности сжатия данных 336
7.2. ПКЕ и скрытые параметры 337
7.3. О языке ПКЕ 339
7.4. Зачем нужен ПКЕ 346
7.5. Учет случайного фактора в ПКЕ 350
7.6. Индивидуальность элементарных частиц и ПКЕ 353
7.6.1. Критерий согласия Пирсона 354
7.6.2. Индивидуальность экземпляров частиц 357
7.6.3. Параллельные алгоритмы квантового моделирования . 362
7.7. Заключение 364

ПРИЛОЖЕНИЕ. **Теория квантовых вычислений** 367
1. Формальное определение квантовых алгоритмов 367
2. Почему КК делает перебор вариантов необыкновенно быстро 370
3. Алгоритм Гровера 370
3.1. Преобразование Уолша–Адамара 371
3.2. Операция инверсии и ее реализация на квантовом компьютере 372
3.3. GSA 374
3.4. Как искать решения, если их много? 375

3.5. Когда бывает удобно часто измерять 377
4. Квантовое преобразование Фурье (QFT) 378
4.1. Что общего между цветовым зрением и факторизацией целых чисел? 378
4.2. Квантовое преобразование Фурье и его основное свойство 379
4.3. Реализация QFT на квантовом компьютере 381
5. Факторизация, оптимизация, моделирование и распознавание 384
5.1. Факторизация целых чисел 384
5.2. Решение задач дискретной оптимизации 386
5.3. Распознавание структур и функций 387
6. Обобщения алгоритма Гровера 389
6.1. Вычисление матриц 390
6.1.1. Приближенное вычисление 390
6.1.2. Точность приближения 392
6.2. Нахождение собственных значений 392
6.3. Нахождение собственных векторов 394
7. Реалистические модели квантовых компьютеров 395
7.1. Об использовании тождественности фермионов 395
7.2. Однокубитовое управление в квантовых вычислениях 397
7.2.1. Реализация квантового преобразования Фурье на однокубитовом управлении 398
7.3. Формализм чисел заполнения 406
7.4. Вычисления, управляемые с помощью туннелирования 408
8. Коррекция ошибок в квантовых вычислениях 411

Литература 418

Предисловие

Сначала я намеревался назвать книгу «Алгоритмической физикой». Но потом заменил в названии алгоритмичность на конструктивизм. Дело в том, что конструктивизм — течение в математике, которое содержит алгоритмику, но не сводится к ней. Книга посвящена анализу математического аппарата квантовой механики и обоснованию необходимости и желательности замены этого аппарата на конструктивную математику. Основные примеры взяты мной именно из квантовой механики, поскольку эта дисциплина является не только величайшим творением человеческого ума, но и единственной возможной отправной точкой для настоящего развития естествознания. Поэтому в действительности речь идет о математическом аппарате физики в целом. Фундаментальные явления коллективного типа лежат в той области, где начинают сказываться элементы реальности, отбрасываемые при получении стандартных математических абстракций. Это свидетельствуют о серьезных изъянах используемого в физике стандартного математического аппарата, основанного на математическом анализе, алгебре и классической логике. Примером может служить широко известный квантовый компьютер, проблема масштабируемости которого не поддается анализу традиционными средствами.

Проблема масштабируемости квантового компьютера является, по существу, новой редакцией старого вопроса об описании декогерентности в квантовой теории. Это препятствие очень серьезно, так как только преодолев, его мы получим возможность изучать по-настоящему сложные системы, составляющие предмет химии и биологии. Я убежден в том, что именно конструктивизация физики позволит это сделать. В этой книге описан путь, следуя по которому мы можем сделать физику конструктивной. Необычность задачи, которую я ставил при написании текста, требует более развернутых объяснений предпринимаемых шагов, чем это принято в физико-математической литературе. Эта книга представляет собой только введение в физический конструктивизм, но не полное его описание. Реальное построение конструктивной физики требует большого труда, в том числе серьезной и увлекательной работы программистов.

Конструктивная физика нацелена на решение главной проблемы: построение компьютерных моделей сложных систем, включая, в перспективе,

живые объекты. Для решения этой проблемы необходимо распространить методы квантовой механики на ансамбли, содержащие более 10^{15} частиц. Ключевым моментом здесь является описание запутанных состояний многих частиц, для чего Р. Фейнман предложил построение квантового компьютера.

Конструктивизм трактует квантовый компьютер как универсальную модель сложной системы, в которой декогерентность, то есть отклонение эволюции от унитарной, представляется в виде ограниченности вычислительных ресурсов классического моделирующего компьютера. Таким образом, мы будем моделировать не абстрактные решения уравнения Шредингера и — отдельно — измерения квантовой системы, а ее реальную эволюцию, в которой декогерентность есть постоянно действующий встроенный фактор. Именно такая постановка задачи моделирования позволяет надеяться на то, что нам удастся довести до конца решение задачи на компьютерах существующего типа, возможно, с использованием запутанных квантовых состояний в качестве элемента управления.

Конструктивный формализм содержит по крайней мере один элемент, аналога которого нет в стандартном. Это — понятие экземпляров реальных частиц и связей между ними. Если эти экземпляры представляют одну реальную частицу, связи обеспечивают ее квантовое поведение, если же они представляют разные реальные частицы, связи формируют эвереттовский квантовый мир. Экземпляры частиц и связи между ними являются абстрактными объектами, принадлежащими так называемой административной части модели. Такая трактовка компьютерных моделей реальности открывает перед нами совершенно новые возможности.

Перестройка гигантского здания современной физики на конструктивный лад способна открыть нам дорогу к пониманию сложных процессов в том смысле, который вкладывается в слово «понимание» в точных науках. Речь идет, по существу, о новой дисциплине — квантовой физике многочастичных систем, которую можно построить только на путях конструктивизма. Я надеюсь, что чтение этой книги вдохновит любознательного читателя на практическое участие в этом интереснейшем и важном деле.

Я благодарю академика К. А. Валиева, который впервые в России стал заниматься вопросами реализации квантовых вентилей и обратил мое внимание на серьезность проблемы декогерентности в физике квантовых компьютеров, а также оказывал неизменную поддержку моим усилиям по развитию физического конструктивизма. Я также хочу отметить активное участие А. Ю. Чернявского в обсуждении эвристики коллективного поведения, В. Кукушкина и С. Жарова в усилиях по ее компьютерной реализации, Е. Зеленцова, Т. Зикрина и других за обсуждение, К. С. Аракелова, К. К. Буртно-

го, Б. Аксенова и Д. Лашкова в прояснении деталей реализации ПКЕ, а также С. Н. Молоткова, И. А. Семенихина, Ю. И. Богданова и А. В. Шеверева за полезные замечания. Я также признателен Л. К. Гроверу, общение с которым помогло мне на раннем этапе моей работы по квантовым компьютерам.

Моя отдельная благодарность академику В. П. Маслову за его энтузиазм к моим ранним работам по квантовым вычислениям.

Ю. Ожигов

МГУ им. М. В. Ломоносова,
факультет ВМК, кафедра квантовой информатики

Введение

1. Алгоритмы и будущее физики

Физика, бывшая безусловным лидером в естествознании XX века, сейчас уступает свое видимое положение таким дисциплинам, как биология. Это не означает, что предмет нашей науки утратил актуальность или широкую общественность перестало интересовать как устроен мир. Напротив, именно сейчас происходят самые интересные процессы, связанные с некоторым пересмотром основ. Такие идеи, вообще говоря, никогда не исчезали (по крайней мере, из разговоров), но именно сейчас они обрели ту степень зрелости, которая позволяет придать им форму реального поворота. Этот поворот пока не произошел, но его, в общих чертах, можно уже предвидеть, исходя из имеющейся ситуации.

Современную ситуацию в физике следует рассматривать как безусловно кризисную, и родословная этого кризиса точно та же, что и кризиса в математике в первой трети XX века: это кризис аксиоматического метода. Это — проблема целостности естествознания, и она связана с трудностью в самой математике, которая не была вполне разрешена. Аксиоматический метод, о котором принято думать как об эталоне надежности, в действительности таковым не является, и привлечение эксперимента для решения вопросов пригодности того или иного математического аппарата становится не только вполне законным, но и неизбежным делом. Это было осознано после краха гильбертовской программы, о чем пойдет речь ниже. Для нас очень важен рецепт, который был предложен для выхода из кризиса для математики, так как теоретическая физика должна будет пойти именно этим путем. Этот рецепт, применительно к математической логике, был сформулирован так: в формализм должны быть введены процедуры, и это будет известным урезанием его возможностей. Такое урезание стало называться конструктивной математикой. Сейчас мы обладаем более точным набором инструментов конструктивной математики, и поэтому мы сформулируем требование конструктивизма более определенно: **формулы должны быть заменены алгоритмами**. Это, конечно, не означает, что формулы не надо использовать, просто под каждой формулой в действительности должен по-

ниматься некий алгоритм ее применения.[1] Поэтому физический конструктивизм имеет более благоприятную почву, и здесь его идеи, несомненно, получат дальнейшее развитие.

Почему конструктивизация физики неизбежна? Потому что простые задачи с одной или двумя частицами (для состояний которых достаточно функций шмидтовского типа, то есть по существу одночастичных) уже решены, а для более сложных задач методы формул не работают. Здесь надо пояснить, что я имею в виду под сложными задачами. Если мы рассмотрим газ, состоящий из 10^{20} шарообразных частиц малого размера (размер их намного меньше расстояний между ними), и заданного простого закона соударений, то для такой системы можно ставить вопрос о том, какова будет средняя энергия этих частиц, приходящаяся на единицу объема занимаемого ими пространства, какова будет температура, давление и т. д. Это вопросы о статистических величинах, и их вычислением занимается статистическая физика.

Для газа, состоящего из разных атомов, можно поставить задачу другого типа: какова сравнительная вероятность того, что некоторые частицы этого газа примут вид аминокислоты или нуклеотидного звена, при условии, что начальные состояния всех частиц заданы с известной погрешностью? Это будет задачей как раз о редких событиях, но для ее решения нам с очевидностью не хватит никаких разумных вычислительных ресурсов, так как придется перебирать совершенно неподъемное число вариантов: порядка экспоненты от числа 10^{20}.

Можно было бы объявить такого рода задачи пустым упражнением, не имеющим никакого отношения к реальности, но это было бы неправдой. Сам процесс жизни есть цепь таких событий, из которых каждое в отдельности кажется невероятным. Но если хоть одно из этих редчайших событий происходит в огромном объеме вещества, сам этот факт может принципиально изменить путь его эволюции. Природа этих событий такова, что получившиеся в результате структуры сами используют вероятностные свойства среды для собственного усложнения, при котором вероятность следующих подобных событий многократно возрастает. Такие процессы не поддаются изучению стандартными методами точных наук. Статистические методы, господствующие в современном естествознании, не рассматривают такие события, поскольку их вероятность чрезвычайно мала. Поэтому они исключаются из рассмотрения именно на начальном эта-

[1] В среде чистых математиков конструктивизм не является общепринятым, несмотря на то, что он уже хорошо разработан. Для физиков он более привычен, так как необходимость соотношения формул с экспериментальными данными требует некоторой априорной процедурности.

пе, когда структура, представляющая интерес, еще не очень сложна и могла бы быть предметом моделирования. На более поздних стадиях, когда фактор малой вероятности исчезает, и структура работает подобно автомату, построение ее модели на основе «первых принципов» снова делается невозможным уже в силу ее сложности! Итак, чтобы понять функционирование сложных структур, мы должны подыскать методы описания, при которых чисто стохастические эффекты были бы за скобками рассмотрения.

Сложные системы имеются не только в биологии. Вот вариант такой недоступно сложной задачи из космологии, решение которой прямо затрагивает всех нас. Можем ли мы гарантировать, что в течение обозримого времени орбита Земли не претерпит существенных изменений, которые сделают наше существование невозможным? Задача трех тел в классической механике не имеет аналитического решения, а задача большего количества тел не имеет и надежных численных методов решения — по крайней мере, если речь идет о достаточно больших промежутках времени. Движение Земли в поле тяготения Солнца, с учетом влияния Луны, Юпитера и Сатурна, относится как раз к такому типу.

Несмотря на безусловную важность задач космологии, я считаю (и это мнение разделяется многими), что мы имеем больше шансов достичь успеха в тех задачах, где человеческая практика в большей мере может прийти к нам на помощь. Примером являются задачи химии и биологии. Это ни в коем случае не является дискриминацией космологии. Просто я считаю, что устройство больших тел и их эволюций может оказаться еще сложнее, чем устройство молекул и атомов, несмотря на то, что такая космологическая эволюция является макроскопической, и потому в космологии велика роль наблюдений, а заниматься «детальной» теорией еще труднее, чем решать задачи о редких явлениях в газе.[2]

На самом деле, мы пока не можем решить даже гораздо более простые, но практически важные задачи. Например, задача о переходе к турбулентному движению в среде со скоростями и вязкостью, исчерпывающей теории которого до сих пор не создано и которое обычно описывается уравнением Навье–Стокса.[3]

[2]Вот пример задачи для «детальной» теории в космологии: выяснить, есть ли в данной галактике планеты, где человек мог бы находиться без скафандра? Решение такой задачи выходит за пределы наших возможностей. Мы просто не знаем, как надо развивать космологию для их решения, потому что здесь человеческая практика нам ничем помочь не может. Зато в задачах химии такая практика играет громадную роль, и мы можем рассчитывать на то, что продвижение в подобных областях поможет нам и в задачах космологии.

[3]Очевидная важность такой задачи для авиапромышленности побуждает учреждать денежные премии за решение этого уравнения.

Явный запрос практики состоит в решении задач, относящихся к сфере химии и биологии. Примером может служить создание обладающей предсказательной силой модели живой клетки. Известно, что живая клетка может резко изменить свое поведение под действием одного-единственного фотона определенной частоты, попавшего на ее мембрану и запустившего целый каскад химических реакций, приводящий к изменению движения клетки. Все эти реакции должны предсказываться моделью, и всюду в дальнейшем я буду вести речь именно о таких моделях.[4]

Химия и биология изучают так называемые системы со сложным поведением. Что мы понимаем под сложностью поведения? Это невозможность описания динамики с помощью систем дифференциальных уравнений. С этих позиций механическое движение спутника в Солнечной системе не является сложным (хотя решение систем уравнений может потребовать значительных затрат времени), а столкновение 10 разных атомов в замкнутом пространстве является сложным. Сложность поведения обычно связывают с принципиальной ролью случайного фактора. Какова его природа? Рассмотрим классический источник случайности: задачу о падении вращающегося кубика на твердую поверхность стола. Если мы можем предсказать, на какую сторону он упадет, анализируя его уравнение движения, с учетом подскоков от стола и начальных условий, то никакой случайности фактически нет; пусть предсказать результат трудно, но это можно сделать, решая уравнения. Этот случай называется псевдослучайностью. Но в нашей задаче могут быть (и обязательно возникают) особые случаи, например, когда кубик приземляется точно на одну из граней. Тогда мы имеем точку неустойчивости в его конфигурационном пространстве, и уравнения механики ничего не могут сказать о том, куда же все-таки упадет наш кубик. В этом случае решающую роль играют не уравнения его движения. Эта роль переходит к процессам на уровне отдельных атомов, находящихся на грани кубика, и атомов стола в области касания, то есть становится предметом квантовой механики.

Таким образом, **источником любого типа случайностей являются квантовые явления.** Этот вывод справедлив не только для традиционных задач физики (фазовые переходы, возникновении турбулентности в жидкости, устойчивости горячей плазмы), но и — в большей мере — для совершенно новой области, куда мы хотим распространять точные методы: модели жизни. Если мы хотим, чтобы модель сложных процессов хоть для чего-то была полезна, кроме показа красивых картинок, мы должны строить такую модель на основе квантовой механики.

[4] А не о простых анимациях в духе движущихся картинок, от которых никто не ожидает предсказательной силы.

Мы вправе ожидать, что создание моделей сложных систем возможно на нашем современном уровне, то есть правильный учет квантового характера элементарных частиц, входящих в простейшую живую клетку, даст нам именно такую модель. Для таких моделей нужно уметь применять квантовую физику к системам, состоящим из миллионов частиц. Вряд ли продуктивно пытаться строить модели живых существ без использования всего арсенала квантовой физики. Нельзя также сводить квантовую природу реальности к неким поправкам к упругим силам, которые действуют в молекулах. Квантовая физика содержит принципиальную нелокальную составляющую, смысл которой в том, что ансамбль нельзя свести к его составляющим. Роль квантовой теории совершенно не в так называемых квантовых эффектах, которые исчезают на больших расстояниях или для больших скоростей. Эта дисциплина служит отправной точкой для изучения сложных (потенциально — макроскопических размеров) систем на настоящем уровне строгости, позволяющем создавать модели поведения таких систем, обладающие предсказательной силой.

Итак, главная интрига состоит в том, что физика должна применяться к сложным процессам, в которые вовлечены миллионы частиц. Но современная квантовая теория пока совершенно не готова к такой роли. Ее предметом исследования являются простые системы, как правило, состоящие из одной-двух частиц или сводящиеся к ним. Между тем, квантовая механика теоретически предсказала наличие так называемых запутанных состояний пространственно удаленных частиц, которые затем были обнаружены в многочисленных экспериментах не только над фотонами [6, 22], но и над массивными частицами (см., например, [11]). Именно эти принципиально многочастичные феномены лежат в основе химических реакций, а также того, что называется общим термином процесс жизни. Настоящее понимание таких процессов может быть достигнуто средствами физики, и я попытаюсь, насколько возможно, убедить в этом читателя. Но для этого физика должна приобрести конструктивную форму.

На физический конструктивизм можно взглянуть очень приземленно. Сложившаяся ситуация говорит о том, что главным элементом физики будут компьютеры. Их служебную роль во всех областях науки, в принципе, никто особенно и не оспаривает. Своеобразие состоит в том, что именно в физике они станут играть не служебную, а организующую роль. Подобная мысль может показаться странной, так как в фундаментальной физике организующую роль всегда играл математический аппарат. Я попытаюсь обосновать идею о том, что именно математический аппарат физики и должен измениться под влиянием компьютеризации. Такую физику можно назвать алгоритмической, в знак того, что алгоритмы будут играть в ней ту роль, ко-

торую традиционно играют формулы. Однако более правильно называть ее конструктивной физикой, так как здесь ключевым моментом является продолжение великих традиций конструктивизма, заложенных в математике.

Такой серьезный поворот в современной физике неизбежен. Моя уверенность в этом основана на существовании готового математического аппарата: это конструктивная математика, включающая конструктивный математический анализ и элементы алгоритмической алгебры, практически завершенная (не считая нескольких нерешенных задач) теория алгоритмов, а также развитая техника программирования и компьютеры с достаточным быстродействием. Я попытаюсь показать, что эта база является вполне добротной и физика может быть переведена на конструктивный язык без особых проблем. Конструктивизация физики опирается, таким образом, на надежный фундамент, разработанный в достаточной степени для начала его регулярного применения в физике. Я буду говорить о квантовой теории, но это, разумеется, не означает того, что это и есть вся возможная зона приложения конструктивизма; этой зоной является вся физика и даже более того.

Сложные системы, формально принадлежащие к химии и биологии, представляют собой целый малоисследованный континент, в дебри которого трудно решиться проникнуть представителю точных наук. Конструктивизм дает нам новый инструмент невиданной эффективности, с помощью которого мы сможем освоить эту сферу.

Я надеюсь, что читатель отдает себе отчет в том, что полный перевод физики на конструктивный (а по существу — на алгоритмический) язык — это задача, посильная только многочисленному отряду исследователей. В этой книге я стараюсь убедить его в том, что такой перевод осуществим в рамках достаточно рутинной работы, и в том, что он крайне желателен как для тех, кто решил связать свою жизнь с научными исследованиями, так и для тех, кто ожидает от науки реальной отдачи.

Важнейшим доводом в пользу конструктивной физики является то, что она дает нам визуальную картину реальности без ущерба для точности.[5] Алгоритмизм позволяет создать наглядную картину динамики сложной системы в форме видеофильма, и это, пожалуй, является самым убедительным доводом в его пользу. Книжная форма не дает автору такой возможности. Моя цель здесь будет немного иной. Я приведу формальные до-

[5]Такие вещи не принято обсуждать в физико-математической литературе, но разная роль формул и алгоритмов связана с разной формой восприятия человеком этих типов математического аппарата. Если формулы представляют довольно узкую полосу восприятия и обработки информации, связанную с логическим мышлением, то алгоритмы задействуют личность пользователя более широко, так как используют еще и его образное мышление.

воды в пользу алгоритмизма, показав его полную законность в структуре физико-математических дисциплин. Эта задача важна, поскольку конструктивная математика не преподается студентам физических специальностей и потому существуют известные опасения при использовании языка алгоритмов в теории. Такие опасения беспочвенны: алгоритмы даже более надежны, чем формулы. Мы увидим, что алгоритмизация физики сохраняет всю привычную среду работы теоретиков практически без изменений. Однако алгоритмика позволяет навести порядок там, где сейчас царит известная неопределенность. Такая роль свойственна именно математическому аппарату, а не техническому сервису.

Возможность прямого сравнения традиционного математического формализма с алгоритмикой появилась недавно, и она связана с известным проектом масштабируемого квантового компьютера. Этот проект фактически проверяет действие квантовой механики в области, в которой она никогда ранее не проверялась — в области многих частиц, то есть там, где должен работать именно многочастичный гильбертов формализм. Проект квантового компьютера беспрецедентен по масштабу и значению для развития квантовой теории. Его результаты говорят о том, что квантовая теория в области многих частиц должна быть пересмотрена. В этом и состоит главная задача физики квантовых компьютеров. Достаточно широкое понимание необходимости такой ревизии дает мне надежду, что данная книга будет восприниматься рационально и читатель сможет самостоятельно оценить значение приведенных мной аргументов в пользу алгоритмики.

Современное развитие естественных наук и техники ставит нас перед необходимостью распространения точных методов теоретической физики на химию и биологию. Описательный характер наших представлений об устройстве и функционировании сложных систем в природе не позволяет нам продвинуться в их понимании в той мере, в какой это способна сделать наука. Предлагаемый в связи с этим синтез знаний, или междисциплинарность, является совершенно правильной общей идеей, но для получения конкретных результатов необходимо распространение точных методов физики на сложные системы. Любой другой подход, игнорирующий математические методы в теории, обречен на неудачу. Говоря о известном пересмотре основ квантовой теории, мы всегда будем иметь в виду именно модификацию математического аппарата, а не отказ от него. Модификация, которую нам предстоит осуществить, достаточно серьезна. Одна из целей книги — показать, что такая модификация есть единственная реальная возможность включить в сферу физики сложные системы. Только эта цель будет для нас оправданием всей работы. Естественно, здесь возникает вопрос преемственности, а именно гарантий того, что планируемая модифи-

кация не оставит за бортом ничего из уже сделанного. Этот вопрос самый трудный и его невозможно решить как задачу с точной формулировкой, поскольку математический аппарат невозможно построить подобно одной из физических теорий.[6]

Собственно, нам и выбирать не нужно, так как возможности построения нового формализма уже реализованы в виде конструктивной математики. Она и представляет тот самый новый математический аппарат, который необходимо принять.

2. Конструктивизм и его роль в квантовой теории

Идея внедрения в квантовую физику конструктивных методов возникла почти сразу после их появления. В работе [9] Дж. фон Нейман и Г. Биркгофф предложили заменить в квантовой физике классическую логику конструктивной.[7] Сейчас нам известно гораздо больше, чем в те времена. Возникли целые новые области: теория алгоритмов и основанные на понятии алгоритма конструктивный математический анализ и конструктивная (или алгоритмическая) алгебра.

Хорошо известно, что главным видимым препятствием для распространения точных методов естествознания на сложные системы являются вычислительные сложности, которые при этом возникают. Поэтому теория вычислений неизбежно должна играть в этом процессе фундаментальную роль, и сами вычисления должны рассматриваться не как технический сервис, а как неотъемлемая составная часть новой физики — физики сложных систем. Конструктивизм дает для этого необходимое теоретическое обоснование в том смысле, что он определяет общий вид математических инструментов, которыми надо заменить традиционный язык формул и классических доказательств. Но этого мало для получения надежных результатов, составляющих цель физики.

В сложных системах мы не можем рассчитывать на ту надежность, которая обеспечивалась численной точностью, например вида атомных спектров; но можно заново переформулировать, что означает точность для таких систем: это может быть точность воспроизведения сложных сценариев

[6]Используя аналогию из программирования, можно уподобить матаппарат операционной системе.

[7]Я познакомился с этими идеями на семинаре А. Г. Драгалина в МГУ в 70-х годах. Семинар был посвящен возможным применениям интуиционнзма в квантовой теории, и с этого момента я осознал, сколь определяющую роль в теорфизике играет то, что называется основаниями математики. Эта роль такова, что было бы правильнее говорить об общих основаниях физики и математики.

их эволюции. Если мы нашли такой метод построения правдивых динамических сценариев, мы сможем получить и точные значения в старом смысле слова. Надо иметь в виду, что в конструктивизме сохраняется вычислительная часть математического формализма, которую мы всегда можем привлечь для получения точных численных оценок в традиционном смысле.[8] Для сложных систем проблему представляет именно получение верных сценариев эволюции; для этой цели и нужен конструктивизм. Именно такое понимание точности будет у нас для сложных систем.

Здесь проявляется своеобразие конструктивной физики. Если в традиционной квантовой теории можно было получать результаты на кончике пера, то есть теория уже непосредственно давала предсказания экспериментальных данных, то в конструктивизме между теоретиком и экспериментом есть очень серьезный посредник — компьютер. Его роль в традиционной физике — техническая; там он реализует так называемые математические, или вычислительные, методы. Мы увидим, что для сложных систем это не подходит. Конструктивизм — это не совершенствование вычислительных методов квантовой теории, а ее новая форма.[9] Здесь создание компьютерных программ и работа с ними отчасти входит в саму теорию, точно так же, как техника решения дифференциальных уравнений — в арсенал традиционного физика-теоретика.

Конструктивная математика не дает нам непосредственно компьютерные программы, которые можно было бы реализовать, скажем, с использованием существующих прикладных пакетов. Она даже не дает нам сами алгоритмы, которые еще нужно строить, используя так называемые конструктивные эвристики. Требующееся здесь программирование является, таким образом, концептуальным, а не техническим, так как уточняться должны будут сами алгоритмы. Продвижение здесь требует так называемой индустриальной формы программирования, которая рассчитана на работу коллективов программистов над одним проектом. Необходимые для такой работы программные и методические средства появились сравнительно недавно. Именно существование таких средств дает мне уверенность

[8] Было бы наивно ставить задачей состязаться с эффективностью, например, аналитических методов для электрона в кулоновском поле неподвижного заряда, или тому подобных стандартных задач. Вся аналитическая техника входит в конструктивизм, и мы можем ею пользоваться, правда, с соблюдением предосторожностей, о которых пойдет речь ниже. Наша задача — не соревноваться с аналитикой, а обеспечить стыковку с многочастичным миром, где уже нет и не может быть никакой аналитики.

[9] В традиционной физике существуют пакеты прикладных программ, использование которых непосредственно теоретиками не требует специального участия программистов. Необходимость привлечения специалистов по программированию является практическим критерием, определяющим границу с конструктивизмом; здесь участие программистов является обязательным, так как оно несет концептуальную нагрузку.

в том, что можно разбить задачу описания сложных систем на конкретные технические задания, без чего физический конструктивизм был бы простыми разговорами.[10] Мы не будем заниматься здесь вопросами, связанными с программированием, а вместо этого рассмотрим, как могут выглядеть конструктивные эвристики для сложных квантовых систем.

Мы можем говорить о традиционной форме теории только при обосновании эвристик — при их применении к простым системам, где действует традиционная квантовая теория и где требуется полное соответствие известным фактам. Для сложных систем, где традиционная теория неприменима, в нашем распоряжении будут только алгоритмы, полученные на основе эвристик, а также возможность некоторой ревизии самих эвристик.

3. Мое видение истории конструктивизма

Исходным пунктом для написания книги явились мои собственные работы в области квантовой информатики и квантовых вычислений. Именно они привели меня к ясному пониманию действительной природы проблем квантовой информатики как области многочастичных квантовых явлений, тех потрясающих возможностей, которые открывает перед естествознанием развитие компьютеров, и того, какая мизерная часть этих возможностей освоена существующими математическими методами.

Непосредственная причина для обращения к конструктивизму связана с проблемой квантовых вычислений и квантового компьютера. Квантовый компьютер был предложен Р. Фейнманом [18], а также рядом других авторов (см., например, [7]) как необходимый инструмент моделирования квантовой физики многих частиц, поскольку на классическом вычислительном устройстве невозможно преодолеть экспоненциальный вычислительный барьер, возникающий при рассмотрении сложных систем многих частиц в рамках стандартной квантовой теории. Эволюция моего понимания этой задачи повторяет ее историю: от первоначальной идеи о необходимости квантового компьютера, формализации этого понятия, эйфории 80-х, к более глубокому взгляду на проблему в свете трудности аппаратной реализации квантового компьютера и наконец — к необходимости пересмотра основ квантовой теории в области многочастичных систем на основе алгоритмического подхода.

[10]Примеры таких разговоров читатель может найти в истории физики в большом количестве, и я не намерен их здесь обсуждать. Это надо четко отличать от тех совершенно конкретных блок-схем алгоритмов, которые я в дальнейшем называю конструктивными эвристиками и которые служат основой для нужного нам программирования.

Квантовые вычисления возникли первоначально как математическая теория, основанная на традиционном формализме Гильберта для квантовых систем. Однако самым важным здесь оказывается пресловутая проблема декогерентности, то есть отклонение эволюции реальных квантовых систем от идеальных унитарных операций, на которых основан не только квантовый компьютинг, но и вся аналитическая часть квантовой теории. Физика квантовых компьютеров оказалась гораздо более фундаментальным предметом, чем собственно квантовые вычисления.

Назревший серьезный поворот в развитии квантовой теории в действительности касается всего естествознания и имеет глубокие корни. Он фактически является продолжением программы Гильберта о завоевании математикой всех естественных наук, начиная с физики. Эта идея лежит в основе его знаменитой программы, сформулированной в начале XX века. Гильбертовская программа преобразования естествознания потерпела неудачу из-за того, что основывалась на аксиоматическом методе. Гедель показал, что этот метод не годится даже для обоснования самой математики, не говоря уже о распространении ее методов на физику и химию.

Однако значение идеи Гильберта не уменьшилось от этой неудачи. Его программа привела к удивительному: появлению новой математики, которую принято называть конструктивной. Идея конструктивности, исторически возникшая немного раньше теории алгоритмов, появилась как ответ на неудачу гильбертовской программы аксиоматизации естествознания. Эта идея завоевывала место под солнцем сначала в полемиках Гильберта с Кронекером,[11] затем в появлении интуиционизма Брауэра, потом в появлении точного понятия конструктивной процедуры-алгоритма, авторами которого были Тьюринг, Пост и Марков-младший. Уже после этого возник так называемый конструктивный математический анализ и конструктивная алгебра, что и завершило создание удивительно стройного и мощного здания конструктивной математики. Конструктивизм ставит во главу угла процедуры получения нужных объектов, а не логическое обоснование их существования. Это значительно более физический подход к формальному аппарату. Рассмотрение многих разделов физики с позиций конструктивизма устраняет формальные нестыковки и нестрогости, к которым неизбежно приводит классическая математика. Примером может служить техника фейнмановских интегралов по траекториям. Сейчас можно с уверенностью сказать, что потенциально конструктивная математика представляет собой более современный и более удобный формальный аппарат физики, чем традиционная (классическая) математика.

[11] Основоположниками интуиционизма являются Брауэр (см. [15]) и Кронекер. Спор последнего с Гильбертом касался законности доказательств чистого существования, составляющих гордость аксиоматического подхода, защищаемого Гильбертом.

Конструктивизм имеет свою историю, начавшуюся еще до формального определения алгоритмов Тьюрингом. Эта история связана с основой конструктивной математики — конструктивной математической логикой. Логический конструктивизм признает только те факты, которые можно установить формальными процедурами с точно определенными деталями. Например, в конструктивизме признается только такое доказательство существования, из которого можно извлечь процедуру получения требуемого объекта. Чистых доказательств существования конструктивизм не признает. Конструктивная математическая логика называется интуиционизмом.

Система образования, в силу неизбежной инерции, оставляет пока конструктивизм в полутени, несмотря на то, что именно он предоставляет математический фундамент в виде, удобном для физиков-теоретиков: формализм, свободный от «математической лирики».[12] Между тем есть веские основания предполагать, что именно систематическое применение такого формализма способно дать нам точные знания о природе сложных систем, которые пока изучаются исключительно экспериментальными средствами. Мы проследим только те немногие выводы из конструктивного подхода, которые можно сделать «вручную»; для дальнейшего продвижения надо использовать программирование, и это выходит за рамки книжного формата. Мы увидим, что конструктивизм дает возможность свести большую часть исследования к написанию технических заданий для программистов. Здесь можно только привести общие доводы в пользу того, что такие технические задания должны привести нас к цели, и я постараюсь делать это всегда, где только возможно.

Настоящий триумф конструктивизма впереди. Он связан с появлением новых возможностей в сфере индустриального программирования, которых не существовало еще десять лет назад и которые дают возможность объединить естественные науки. Есть целый ряд свидетельств в пользу того, что такое объединение естественных наук на основе техники программирования должно произойти довольно скоро, и это объединение не будет иметь прямого аналога в прошлом.

4. Краткий обзор содержания

Главной особенностью физического конструктивизма является то, что мы предъявляем к нему требования универсальности и масштабируемости. Он, в идеальном случае, должен охватывать все известные масштабы и виды взаимодействий, изучаемые в естествознании. Поэтому на нашу попыт-

[12] Слова Л. Д. Ландау.

ку можно смотреть как на электронную систематизацию естествознания, которая отличается от проекта электронного архива статей только тем, что может в некоторых случаях (как я надеюсь) помочь авторам их писать. Мы будем исходить из традиционной иерархии естествознания, согласно которой в его основе лежит физика элементарных частиц, атомов и молекул, на которой строится химия, биохимия, и, наконец, биология. Именно с этим связано название книги и то, что почти весь материал относится к физике.

Наибольшая фундаментальность физики не означает того, что две другие естественные науки менее важны для нас. Обозначенная иерархия носит всего лишь упорядочивающий характер и связана с тем, что атомы состоят из ядер и электронов, молекулы — из атомов, сложные соединения — из простых молекул, живые клетки — из полимеров и огромного количества более простых соединений, и т. д. Такая организация естественных наук связана с атомистической гипотезой, высказанной еще в античности Демокритом, смысл которой состоит в том, что все вещества состоят из элементарных объектов, называемых атомами. Физика XIX и XX веков полностью подтвердила атомистическую гипотезу, превратив ее в основную парадигму науки.[13] В рамках этой парадигмы фундаментальность основных микрообъектов не означает, вообще говоря, их физической неделимости, а трактуется как естественная граница применимости рассматриваемых физических законов. При этом подразумевается, что фундаментальные объекты могут иметь составные части, но эти части подчиняются совершенно другим законам. Такое понимание атомистической гипотезы является очень плодотворным, как мы увидим далее, например, для понимания квантовой теории. Атомистическая гипотеза будет для нас ориентиром и основой для построения алгоритмов, моделирующих поведение сложных систем. Основным понятием в нашем подходе будет понятие частицы, то есть точечного объекта, который помимо координат обладает еще и некоторыми дополнительными характеристиками, например, массой, электрическим зарядом, спином, а также набором его составных частей, например, указанием на то, что атом состоит из ядра и электронов и т. п. Мы увидим, что это очень удобно для описания физических систем независимо от того, трактуются они как классические или как квантовые.

Главным средством реализации алгоритмического подхода будет создание компьютерной программы, служащей для построения модели динамики рассматриваемых систем. Без такой программы трудно рассчитывать на получение каких-либо существенных новых результатов. Все наши рассмотрения будут носить только характер обоснования пригодности описываемых нами алгоритмических методов.

[13] Например, М. В. Ломоносов в XVII веке объяснил температуру как кинетическую энергию движения атомов, сформулировав закон сохранения энергии с учетом этого движения.

Очень существенно то, что предметом моделирования мы будем считать исключительно динамические сценарии эволюции рассматриваемых систем. Вычисление параметров стационарных состояний, например, собственных энергетических уровней, энергий связи, стационарных конфигураций молекул и т. д., мы считаем не конечным продуктом моделирования, а лишь средством отладки моделей динамических сценариев, которые и будут нашей главной целью.

Это делает принципиально важной визуализацию полученных при моделировании сценариев. Визуализация вытекает из самой природы алгоритмической физики. Дело в том, что не существует никакого универсального способа узнать итог работы произвольного алгоритма, помимо его запуска и наблюдения за его пошаговой работой. Таким образом, визуализация результатов моделирования есть единственный универсальный способ определения адекватности алгоритмических моделей динамики. Однако визуализация необходима не только для проверки конечного продукта — модели. Она необходима и в промежуточных этапах построения модели. Например, визуализация необходима для определения того, какие объекты следует считать частицами. Визуализация является универсальным средством взаимодействия программы с пользователем, и именно она обусловливает разделение модели на две части: пользовательскую и административную. Мы считаем пользовательской частью модели те динамические сценарии, которые доступны для обозрения пользователем. Административная же часть содержит реализацию вычислительных алгоритмов, строящих эти сценарии. При таком разделении модели физический смысл можно приписывать только пользовательской части.

В первой главе описываются общие принципы моделирования динамических сценариев, включая генетический метод. Во второй главе дается краткое изложение основных принципов конструктивной математики. В третьей главе мы опишем моделирование процессов методами дифференциальных уравнений в рамках классической физики.

В четвертой главе мы опишем моделирование простых квантовых процессов, для чего приведем краткие сведения из квантовой механики. В пятой главе описывается собственно алгоритмический подход к квантовой теории, которым предполагается заменить гильбертов формализм квантовой механики в области многих частиц. Эта глава является ключевой для всей конструктивной физики. Здесь мы укажем путь урезания ортодоксального (гильбертова) формализма, который позволит погрузить квантовую теорию в общий программный контейнер с другими частями естествознания, которые формулируются на языке частиц, а не волновых функций.

Шестая глава посвящена квантовой нелокальности и обсуждению природы квантовой вероятности. В седьмой главе мы опишем структуру программного контейнера естествознания (ПКЕ) и вопросы согласования языков для его различных частей.

Приложенне посвящено более детальному изложению стандартной теории квантовых вычислений, чем это сделано в основном тексте. Его можно рассматривать как иллюстративный и справочный материал по применению стандартного формализма гильбертовых пространств состояний для многочастичных квантовых систем.

Глава 1

Моделирование динамических сценариев

Формат, в котором задаются критерии успеха физической теории, определяется используемым типом математики. В традиционной математике таким форматом является число. Соответственно, успешной считается та теория, которая дает численное значение той или иной величины с наименьшими затратами. Наиболее простым способом получения единственного числа является его нахождение с помощью формулы, именно поэтому на первом плане в традиционной физике стоит аналитическая техника. Рамки применения такой техники строго ограничены списком задач, которые считаются традиционными. Чем достовернее получаемый с помощью этой техники численный результат, тем более жестко действуют эти ограничения. Не следует даже мечтать о том, чтобы с помощью развития аналитической техники включить в физику даже такую близкую к ней область, как химические взаимодействия. Для такой экспансии физики необходима ее конструктивизация, то есть переход к конструктивной математике. За это придется заплатить цену, отказавшись от численных критериев.

Вместо точности численных оценок придется принять иной критерий: достоверность динамических сценариев. Это не означает полный отказ от прежнего критерия. Численные оценки останутся, но будут играть вспомогательную роль в отладке динамической картины.

Главный критерий в конструктивной физике: дает ли непосредственно данная теория правильный видеофильм описываемого процесса.

Если мы обратимся к классической механике, мы увидим, что на основе ее формул можно с применением простых технических приемов построить правдоподобный видеофильм движения искусственного спутника Земли под управлением тяги его двигателей, и на этом основан успех космонавтики. Но если мы попробуем, применяя такую же программную технику, построить модель ассоциации двух атомов водорода в молекулу на основе квантовой физики, мы потерпим неудачу. Это и есть практическое

применение критерия динамических сценариев. Вторая задача значительно сложнее первой, так как для ее решения не достаточно формул.[1] Эта глава будет посвящена общим вопросам моделирования сценариев.

1.1. Что означает моделирование процессов

Моделирование столь широко применяется, что смысл этого слова очень размыт. Мы уточним, что будет пониматься под ним в данной книге. Моделированием мы будем называть построение алгоритма, который выдает нам объективную картину эволюции рассматриваемой системы в численной или визуальной форме. При этом объективность картины понимается в том смысле, что наш алгоритм опирается на ограниченное число совершенно определенных приемов и обладает универсальностью, то есть его можно применять к широкому кругу систем, так что он всякий раз будет давать правильную картину реальной эволюции.

В идеальном случае областью применимости такого алгоритма должны быть все системы, изучаемые в естественных науках. Наше глубокое убеждение в существовании такого алгоритма и возможности его практического построения вытекает из самого духа конструктивизма. Почему эта возможность имеет такое большое значение? Она означает, что мы можем полностью алгоритмизировать естествознание, тем самым фактически выполнив главный пункт в программе Гильберта.[2]

Алгоритмизация является единственным формальным инструментом для объединения естествознания, который существует в настоящее время. Мы последовательно опишем только начало этого процесса, относящееся к квантовой физике, так, как мы его видим в настоящий момент. При этом очень важным предварительным этапом будет фиксация точных понятий для каждой области, для которых и будет строиться моделирующий алгоритм. Такая работа по формализации физики еще не вполне проделана. Имеющаяся формализация соответствует существующему аппарату аксиоматического построения теоретической физики на основе анализа и алгебры, и она не достаточна для целей алгоритмизации. Нужная нам формализация будет заключаться в некотором дополнительном урезании формальных

[1] Успех химии связан не с формулами, а с тем, что у нас есть возможность огромного числа повторов химических реакций и наблюдения за результатом. Если бы осуществление такой ассоциации молекул было так же сложно, как запуск космического корабля, успехи были бы значительно скромнее.

[2] Во времена самого Гильберта идея алгоритмов была в зачаточном состоянии, и он не имел в виду этот аппарат, говоря о математизации естественных наук. Он ставил во главу угла аксиоматический метод, что и послужило причиной провала попытки такой узко понимаемой математизации.

возможностей математического аппарата, что позволяет говорить о модернизации или о замене этого аппарата на более совершенный.

Первым этапом здесь является представление традиционного аппарата в так называемой кубитовой форме. Эта форма возникла в квантовой информатике, но ее роль универсальна. Кубитовая форма квантовой теории есть вариант стандартного гильбертова формализма, приспособленный для нужд компьютерного моделирования. Кубитовая форма не эквивалентна конструктивизму. Переход к кубитовому представлению есть лишь первый, подготовительный этап конструктивизации квантовой теории.

Урезание возможностей математического аппарата, которого требует конструктивизм, соответствует тому, что происходит при переходе от математики формул к математике компьютерных программ. Важнейшим утраченным понятием будет понятие актуальной бесконечности, которое служит видимой основой математического анализа. Все объекты, рассматриваемые нами, будут конечными. В частности, будет утрачено понятие предела по Коши. Эта утрата, в действительности, ничтожна с точки зрения теоретической физики.[3]

Есть радикальный подход к трактовке математического анализа, который и можно назвать его алгоритмическим урезанием. Это так называемый конструктивный математический анализ. В нем рассматриваются только такие функции, которые можно получить как предел генерируемых алгоритмами последовательностей конечных функций (см. главу 2). В мире конструктивного анализа нет бесконечностей вообще и существуют только непрерывные функции, что радикально отличает конструктивный математический анализ от обычного, и очень хорошо согласуется с физикой.[4] При конструктивном урезании математического анализа полностью сохраняется его вычислительная часть, которая только и представляет настоящую ценность для физики: инструментарий интегрирования и дифференцирования, дифференциальных уравнений и практических методов их решения, включая как чисто аналитическую часть, так и численные методы. Также полностью сохраняются и алгебраический аппарат вычислений, в частно-

[3]Математический анализ можно сформулировать в форме так называемого нестандартного анализа, при котором бесконечно большие и бесконечно малые функции будут просто специальными числами, добавляемыми к обычным числам. Я не буду рассматривать этот путь, так как далее он не используется. Читатель может ознакомиться с ним по книге [69]. Нестандартный анализ обходит трудности введения актуальной бесконечности, но является полностью эквивалентным языком для описания обычного математического анализа, и потому наследует его основные недостатки.

[4]Известно, какие трудности вызывает наличие актуальных бесконечностей для физики. Здесь и расходимость рядов электродинамики, и невозможность нормировки функций типа плоской волны, и бесконечные значения собственной энергии.

сти, симметрийные свойства уравнений, позволяющие применять аппарат теории групп, и т. д. Это позволяет говорить о полной преемственности при переходе от стандартного анализа к алгоритмике. Привыкшие к своему аппарату физики-теоретики не имеют поэтому оснований для ощущения каких-либо принципиальных неудобств. Все фактическое, что было создано их трудами, сохранится в алгоритмической физике.

Однако алгоритмическое урезание не является пустой формальностью. Оно устраняет из физики возможность манипулирования произвольно большими или произвольно малыми числами. Насколько значима такая возможность? Может показаться, что это суживает кругозор и отнимает некоторые важные пути развития. Но это иллюзия. Манипуляции с актуальными (достижимыми) бесконечностями были хороши в период становления аналитических методов в конце XIX века. В настоящее время эти манипуляции являются пустым, но и не вполне безвредным упражнением. Мы покажем, что они приводят к существованию феноменов, не наблюдаемых в экспериментах. Это является признаком серьезного изъяна в традиционном математическом аппарате физики. Вторым неблагоприятным признаком является то, что они блокируют развитие алгоритмических методов в моделировании. Красивые на первый взгляд возможности, предоставляемые аналитико-алгебраическим аппаратом, являются серьезной иллюзией, избавление от которой будет вполне благоприятным для будущего теоретической физики. Нет никаких оснований для сожаления о чем-то серьезном, будто бы утрачиваемом при переходе к алгоритмике. Миражи, с которыми нам надо попрощаться, подобны проектам вечного двигателя. Не стоит также считать, что алгоритмика уступает традиционному аппарату в строгости или в эстетике. Являясь языком формальных текстов программных инструкций, алгоритмика не только не менее эстетична, но и допускает столь же жесткую проверку, как и стандартный язык формул.

В этой главе мы рассматриваем основные положения алгоритмической физики, начав с общих принципов моделирования динамики систем, состоящих из нескольких частиц. Простейшим объектом моделирования является сценарий, или простая модель динамики. Сценарием называется последовательность $\bar{S}$ вида

$$(\bar{S}): \quad S_1, S_2, \ldots, S_t \tag{1.1}$$

состояний рассматриваемой системы. При этом предполагается, что состояние S_j соответствует моменту времени t_j, так что $t_j = t_{j-1} + \Delta t$, $j = 1, 2, \ldots, t$. Следуя принимаемой нами алгоритмической трактовке, мы будем кодировать состояния S_j в виде последовательностей из нулей

и единиц, и под любой процедурой определения S_j понимать некоторый классический алгоритм, который находит код этого состояния. Интервал Δt мы выберем достаточно малым для того, чтобы сценарий (1.1) давал после его разумной визуализации правильное представление о реальной эволюции данной системы, и будем считать интервал времени фиксированным. Мы скажем, что сценарий хорошо описывает реальное поведение системы, если состояние S_j достаточно просто найти, зная состояние S_{j-1} в предыдущий момент времени. Сценарий хорошо описывает поведение классической системы без особых точек, а также, если трактовать S_j как волновые функции моделируемой системы, и поведение нерелятивистской квантовой системы при ее унитарной эволюции.

В релятивистском случае мы должны будем предполагать, что $\Delta t = \infty$, то есть переход от S_{j-1} к S_j является одним из каналов процесса рассеяния. Поскольку каналов рассеяния, вообще говоря, может быть много и каждый из них имеет свою вероятность, то в релятивистском случае сценарий уже не будет хорошо описывать реальную динамику. В нерелятивистском случае при наличии декогерентности мы столкнемся с аналогичной трудностью, так как волновая функция состояния в следующий момент времени уже не будет определена с достоверностью, а только с некоторыми вероятностями, и нам придется рассматривать так называемые смешанные состояния.

Однако и в случае классической физики сценарий не всегда хорошо описывает динамику. Например, в случае наличия особых точек в потенциале силового поля существенное значение может иметь как интервал Δt времени, так и точность определения состояния S_j, то есть длина последовательности нулей и единиц, кодирующей это состояние. Например, в случае движения шарика в поле тяготения по кривой поверхности, имеющей локальные вершины, мы должны знать его скорость, вообще говоря, с бесконечной точностью, так как в противном случае мы не сможем определить, преодолеет он вершину или скатится назад. В этих особых случаях роль начинают играть квантовые эффекты, даже когда речь идет о телах макроскопических размеров. Скорость нашего шарика в особой точке траектории должна обратиться в нуль и, следовательно, его действие на некотором интервале $[t_j, t_{j-1}]$ будет меньше постоянной Планка, что как раз и предполагает в этот момент необходимость применения к шарику квантовой механики вместо классической (см. главу 4).

Аналогичные недостатки у простых моделей динамики есть и в случае систем, состоящих из очень больших тел, например, планетных систем. Поэтому мы немного усложним простую модель динамики, дополнив ее возможностью некоторого выбора сценариев.

Моделью динамики мы назовем последовательность сценариев

$$(M): \quad \bar{S}_1, \bar{S}_2, \ldots, \bar{S}_\omega, \tag{1.2}$$

которая строится, исходя из определенных правил. Модель динамики должна давать полное описание исследуемой системы. Мы проиллюстрируем это на следующем простейшем примере (см. рисунок).

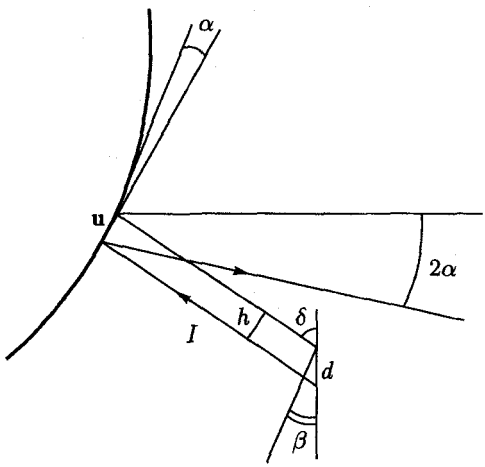


Рис. 1.1. Определение кривизны поверхности

Рассмотрим процедуру распознавания формы удаленного объекта с помощью направленных единичных частиц, способных отражаться от его поверхности. Мы имеем возможность направлять частицы на исследуемый объект, выбирая их направление движения, и детектировать их после того, как они отразятся от его поверхности. Наша задача состоит в том, чтобы найти кривизну $C = \frac{1}{R}$ этой поверхности, где R есть радиус кривизны. Мы имеем:

$$\frac{R}{u} \approx \sin 2\alpha, \quad u = \frac{d \sin \delta}{\sin(\delta + \beta)}, \quad R \approx \frac{d \sin \delta \sin 2\alpha}{\sin(\delta + \beta)}. \tag{1.3}$$

С этой целью мы пустим две частицы, которые достигнут P, и, отразившись, вернутся к нам. Если расположить оси координат, как показано на рисунке, то, зная углы α и β, мы можем по последней из формул (1.3) найти радиус искомой кривизны. При этом мы, разумеется, предполагаем, что α есть малый угол.

Теперь обратим внимание на одну существенную деталь. Если бы надо было восстановить таким образом форму всей поверхности P, мы могли бы рассмотреть плоскость π_y, ортогональную оси y, и разбить ее на квадраты со стороной d. А затем пускать частицы из каждого узла деления π_y и, последовательно пользуясь формулой (1.3), вычислять кривизну $C(X,Y)$ поверхности P, используя в качестве координат X,Y на этой поверхности координаты точки испускания частицы на плоскости π_y. Траекторию отдельной частицы здесь можно назвать сценарием, а последовательность пусков частиц, нужную для восстановления формы P, назвать моделью.

Этот простой пример в действительности очень показателен, так как в качестве частиц можно использовать волны, распространяющиеся в упругой среде, фононы в твердом теле или фотоны в вакууме, наконец, просто атомы или молекулы. Более того, роль отдельного сценария в таком эксперименте может играть измерение некоторого квантового состояния в определенном базисе, зависящем от начальной точки X,Y. Тогда этот процесс будет описывать процедуру квантовой томографии неизвестного состояния. Наконец, можно трактовать отдельный сценарий как химическую реакцию, где состояние реагентов определяется точкой X,Y. Тогда данная схема будет описывать подбор необходимых состояний реагентов для получения желаемого результата.

Важно подчеркнуть, что отдельные сценарии в модели динамики $(\bar{M})$ расположены последовательно. Мы производим над рассматриваемой системой последовательные эксперименты $\bar{S}_1, \bar{S}_2, \ldots$ и на каждом шаге накапливаем информацию об очередном эксперименте в памяти некоего компьютера. При этом, вообще говоря, состояние этой памяти может влиять на исходные условия для очередного эксперимента. Например, если мы обнаружим, что угол β стал слишком большим для применения приближенного равенства (1.3), мы должны уменьшить значение шага d, для того чтобы иметь возможность пользоваться формулой (1.3) для определения кривизны нашей поверхности, или изменить направление движения источника.

Из этого простейшего примера мы можем вывести такие требования к структуре модели.

- Модель состоит из последовательных сценариев.
- Результат каждого сценария сохраняется в памяти компьютера и может использоваться при определении начальных условий для нового сценария.

Эти два условия мы будем называть генетическим подходом к моделированию. Роль генов здесь, как видим, играют сценарии, а модель играет роль

эволюционного процесса. В простейшем случае, который представляется, например, квантовой томографией, эволюция сводится только к накоплению информации о заключительных состояниях рассматриваемой системы в наших сценариях в памяти управляющего компьютера. Так что эта информация используется для подведения итогов моделирования, но не влияет на очередной эксперимент. В более сложных случаях эта информация влияет и на постановку очередного эксперимента, то есть на выбор следующего сценария.

1.2. Визуализация и роль пользователя

Теперь рассмотрим, как может обрабатываться информация о сценариях. Самый общий способ представления сценария $\bar{S}_j$ — это классический алгоритм, который шаг за шагом генерирует состояния нашей системы, соответствующие этому сценарию. Согласно известному результату Тьюринга (см. главу 2), не существует никакого способа узнать результат работы алгоритма, кроме его запуска и непосредственного наблюдения за его работой. Это означает, что в общем случае обработка очередного сценария не может быть реализована в виде компьютерной программы. Обработка сценариев в общем случае является прерогативой человека, пользователя данной модели. Таким образом, мы приходим к выводу о необходимости визуализации сценариев нашей модели для представления их в виде, доступном пользователю.

Визуализация является отдельным и неотъемлемым элементом алгоритмического подхода, и это принципиально отличает его от традиционной формы организации физики, которая основана на формулах. В решении любой физической задачи формулы являются только частью решения. Принципиальную роль играет то, как именно эти формулы применять, что означают входящие в них знаки, почему надо пользоваться данной формулой, а не иными, и т. д. Все это обычно оговаривается текстом. Общепризнано, что такие тексты-инструкции невозможно формализовать, так как здесь имеется то, что принято называть физической интуицией, или чем-то в этом роде. В конструктивной физике неформализуемая часть физических текстов может быть оформлена в виде экспертного решения пользователя алгоритмической модели, которое основано, в конечном счете, на восприятии визуальной картинки. Вся остальная часть физических текстов может быть алгоритмизирована. Точный смысл этих расплывчатых тезисов будет разъяснен в главе 2, где мы познакомимся с вычислениями с оракулом.

Таким образом, неалгоритмизируемая часть работы физика может быть, в принципе, сведена к экспертной оценке визуального образа. Эта

картина является идеальной, и потому очень схематической. Однако именно эта идеальная ситуация отражает то, что мы понимаем под конструктивной физикой. Практически это означает методику теоретического исследования, основанную на алгоритмическом формальном аппарате. Никакого аналога такой методике в обычной теоретической физике не существует, поскольку применение аналитико-алгебраического аппарата для вычисления физических величин и интерпретация самих величин не является формализованной процедурой.

Мы будем заниматься формализацией этой, пока остающейся в тени, процедуры. Нашей идеальной целью здесь будет построение алгоритма с совершенным пользовательским интерфейсом, для работы которого требуется только одно: экспертная оценка пользователем той картинки, которую строит алгоритм. Дальнейшие шаги этого алгоритма зависят от такой оценки. Форма экспертной оценки определяется самим алгоримом. Опять таки, в идеальном случае эта оценка сводится к выбору между «да» и «нет». Однако использование такой формы на практике неудобно в той же степени, в какой неудобно строить алгоритмы в формате, скажем, машин Тьюринга.

Для работы такой модели необходимо постоянное присутствие пользователя, который фактически занимается наблюдением за ее поведением.[5] Модель можно, таким образом, разделить на две части: административную и пользовательскую. К первой части относятся алгоритмы, создающие визуальный образ, ко второй — собственно этот образ. Формализуемая часть физической интуиции относится к адмнистративной части, неформализуемая — ко второй.

Такое разделение, в свою очередь, требует довольно большой, по отношению к традиционному формализму, степени формализации исходных понятий, то есть сведения их к объектам, с которыми может работать алгоритм. Такие элементарные идеальные объекты, вообще говоря, не имеют никакого соответствия в реальном мире. Им нельзя приписать никакого физического смысла, и их роль сводится исключительно к их работе в моделирующем алгоритме. К административной части, таким образом, нельзя применять то, что обычно называют физическим смыслом; она является тем, что называют формальным аппаратом физики. Физический же смысл можно приписывать исключительно тому, что видит пользователь этой модели. Граница между административной и пользовательской частями модели есть, таким образом, граница применимости физического смысла объектов.

[5] Это похоже на вариации многомировой интерпретации квантовой теории (см., например, [61]). Принципиальное отличие нашей ситуации в том, что мы не оперируем метафизическими понятиями, связанными с проявлением «свободы воли». В алгоритмическом подходе есть экспертные оценки визуальных образов, и это понятие вполне конструктивно.

Проиллюстрируем роль пользовательской и административной частей модели на примере моделирования процесса детектирования пары фотонов, находящейся в так называемом запутанном состоянии (в главе 4 мы изучим такие состояния подробнее). Такие пары появляются в нелинейном оптическом кристалле при облучении его лазером; они испускаются одним и тем же электроном при его движении в кулоновском поле ядра после того, как этот электрон поглотил фотон, испущеный лазером. С помощью зеркал можно добиться того, чтобы эти фотоны летели бы в противоположные стороны, так что мы можем детектировать их двумя детекторами, разнесенными на расстояние D, которое составляет несколько километров, так что испускающий фотоны кристалл находится точно посередине между детекторами, на расстоянии $D/2$ от каждого из них. Каждый детектор может быть настроен на определенное направление поляризации фотона, то есть он срабатывает только тогда, когда попавший в него фотон имеет эту поляризацию. Запутанная пара фотонов отличается от обычной тем, что при совпадении настроек двух детекторов, независимо от того, на какую именно поляризацию они настроены, они оба либо срабатывают (при этом раздается щелчок), либо оба молчат. При этом конкретный исход (сработают или нет детекторы) является чистой случайностью, вероятность которой определяется исключительно тем, на какое направление поляризации настроены детекторы. Момент испускания пары фотонов тоже является чистой случайностью, распределение которой определяется соотношением неопределенности «время–энергия» (см. главу 4).

Теперь мы предположим, что у каждого из детекторов расположен независимый датчик случайных чисел, который выбирает настройку поляризации своего детектора за время $\Delta t < D/2c$, где c — скорость света. Таким образом, до точки рождения пары фотонов не может дойти информация о том, на какую поляризацию настроены детекторы, поскольку скорость передачи любой локально созданной информации не может превышать скорость света. В этих условиях мы производим ряд независимых экспериментов, после чего выбираем те из них, в которых детекторы были ориентированы одинаково. Тогда в каждом из отобранных экспериментов оба детектора ведут себя строго одинаково: либо оба молчат, либо в обоих раздается щелчок. Если же мы посмотрим на другие эксперименты, в них детекторы будут вести себя совершенно случайным образом.

Не вникая пока в математическое описание этого эксперимента с точки зрения квантового формализма, попробуем понять, как его можно было бы моделировать с помощью компьютеров. Мы хотим, чтобы наше моделирование было полным, то есть включало бы не только детекторы и фотоны, но и окружающую среду со всеми расстояниями, то есть, например, что-

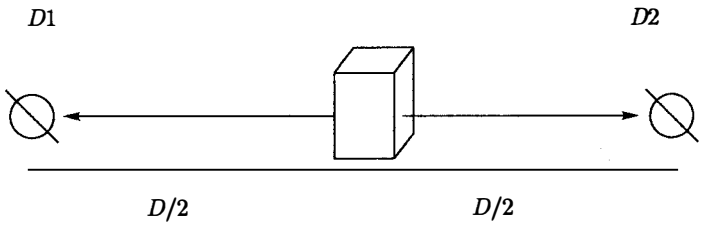


Рис. 1.2. Детекторы

бы моделирование учитывало бы релятивистское ограничение на скорость распространения информации, упомянутое выше. Кроме того, в нашем распоряжении не должно быть ничего, кроме обычных компьютеров и соединяющих их обычных проводов, то есть мы не можем использовать самих запутанных состояний фотонов.

Для простоты предположим также, что у фотонов нет никаких скрытых параметров, то есть щелкнет детектор или нет определяется исключительно самим этим детектором.[6] Если наша компьютерная модель выбирает независимые направления поляризации обоих детекторов, мы должны определить, должны ли совпасть щелчки на детекторах, или нет. Но для этого надо сравнить их поляризации. Если наша модель полностью реалистична, то есть моделирующие компьютеры разнесены на расстояние D, как и положено, мы должны потратить время $D/2c$ на то, чтобы сравнить ориентацию детекторов. Это время больше времени выбора ориентации, поэтому моделирование в режиме реального времени невозможно. Это означает следующее. Любое реалистическое моделирование должно давать нам заранее подготовленный фильм, который просто демонстрируется пользователю, так что пользователь не имеет возможности вмешаться в процесс показа, и что-то изменить по ходу дела. Любое изменение должно происходить так: мы формулируем новые условия, затем модель готовит нам новый фильм, который мы затем просматриваем с самого начала и до конца.

Так работает реалистическая модель, разделенная на пользовательскую и административную часть. Эта общая схема всегда будет иметься нами в виду при описании наших моделей.

Визуализация представляет собой интерфейс взаимодействия с пользователем модели, который приобретает статус эксперта. Это требует более

[6]Если предположить наличие скрытых параметров у фотонов, которые приписываются им в момент рождения, этот эксперимент можно моделировать в режиме реального времени. В главе 6 мы рассмотрим усовершенствование эксперимента, так что даже возможность приписывания таких параметров не позволяет обойтись без априорного знания положения детекторов, то есть информация о состоянии детекторов должна быть заранее известна.

тщательной проработки деталей визуализации по сравнению с традиционным подходом, где эти детали совершенно не важны.[7]

Визуализация может опираться только на атомистическое представление частиц в виде точечных объектов или наборов точечных объектов. Именно так представляются как классические, так и квантовые частицы в методе коллективного поведения (см. главу 5). Гильбертов формализм для квантовой теории многих частиц, основанный на тензорных произведениях пространств состояний, в принципе не допускает визуализации, так как он содержит в себе такие объекты, как масштабируемый квантовый компьютер, который мы будем подробно обсуждать. Вступая на путь визуализации физических процессов, мы берем на себя серьезное обязательство, состоящее в следующем. Мы должны указать такое урезание гильбертова формализма, которое, во-первых, позволило бы представить квантовые ансамбли многих частиц в виде зрительных образов, во-вторых, позволило бы нам практически алгоритмизировать всю достоверную физику,[8] оставляя в неприкосновенности все ее выводы.

1.3. Эволюционный принцип в моделировании динамики

Особая роль визуализации в алгоритмической физике связана с другой ее важной особенностью, которую мы условно назовем эволюционным принципом. Он состоит в том, что модель динамики всегда состоит из последовательных сценариев, так что каждый сценарий является некоторым уточнением предыдущего сценария. Такую смену сценариев можно назвать эволюцией.

Здесь имеется очень важное обстоятельство, связанное с пространством и временем. Дело в том, что каждый сценарий S_j, вообще говоря, содержит свое собственное пространство и время, которое мы будем обозначать, как обычно: x, t. Это пространство-время одного фиксированного сценария имеет физический смысл только в том случае, когда пользователь смотрит фильм, посвященный именно данному сценарию. Если же этот сценарий лишь используется в эволюционном процессе для подготовки какого-либо другого, более совершенного сценария, то время t следует считать административным и ему нельзя приписать физического смысла. Пространство-время одного сценария можно назвать локальным[9] в том

[7] «Мы можем понять то, что не в состоянии вообразить», — это высказывание Л. Д. Ландау выражает дух копенгагенской (стандартной) квантовой теории.

[8] Под достоверной мы понимаем ту часть физики, которая надежно проверена экспериментально.

[9] Некоторые авторы (например, [26]) называют его внутренним временем квантовой системы.

смысле, что точки отсчета O_j для этого пространства-времени задается административной частью модели для именно данного сценария. При этом состояние всех элементов реального мира, не относящихся к данному сценарию, учитывается только при определении O_j.

Переход от одного сценария к следующему также происходит во времени, но это уже иное время. Его мы будем обозначать через τ. Это время является глобальным. Оно является внутренней характеристикой нашей модели. При рассмотрении одного сценария времени τ нельзя приписать никакого физического смысла. Оно определяет последовательность смены сценариев. Однако если пользователь смотрит длинный фильм, который получен последовательной склейкой многих сценариев, то именно время τ является пользовательским и имеет физический смысл, тогда как время t является внутренним, или административным.

Мы оставляем за пределами нашего обсуждения вопрос о том, можно ли приписать административному времени физический смысл в любом случае.[10] Вместо этого будем придерживаться данного выше правила для определения того, какое время имеет физический смысл, а какое является административным.

У некоторых такое соглашение может вызвать недоумение: какое мы имеем право определять, что имеет физический смысл, а что — не имеет (тем более, если речь идет о такой фундаментальной величине, как время)? В действительности же математический аппарат является неотъемлемой частью физики, и определение того, что имеет, а что не имеет физического смысла, является прерогативой этого аппарата. Если мы пользуемся устоявшимся матаппаратом, то вся работа ведется в его рамках, которых мы просто не замечаем. Если нам нужно заменить матаппарат, мы должны смириться с тем, что придется смотреть на вещи более абстрактно. Мы еще вернемся к этому вопросу в главе 2, а также в разделе, посвященном математической логике, которая и занимается обсуждением таких вещей. У читателя не должно оставаться подозрений о том, что здесь есть какие-то темные места. Все, что нужно знать для восприятия дальнейшего, — в разделении модели на пользовательскую и административную часть и тех тезисах, которые я изложил.

Мы считаем, что последовательность сценариев, составляющая модель динамики, есть последовательные шаги подготовки окончательного фильма, который демонстрируется пользователю модели. В некоторых случаях

[10]Это законный вопрос, в особенности для стыковки квантовой механики с ОТО. Сейчас мы оставим его без обсуждения до изучения конструктивной трактовки запрета на скрытые параметры, так как это касается распространения моделируемых систем до самого пользователя.

(см. главу 5) ряд последующих сценариев можно получить из нескольких предыдущих, если рассматривать каждый из них как повторение одного из предыдущих с большим пространственно-временным разрешением. В других случаях последующие сценарии получаются из предыдущих добавлением новых частиц, например, учет испускания фотонов при реакциях ассоциации или диссоциации молекул. Наконец, возможно уточнение модели добавлением новых возможных внутренних состояний одних и тех же частиц. В некоторых случаях такое уточнение модели будет совершенно незначительным. Например, если мы учтем спины атомных ядер при химических реакциях, это внесет очень малую поправку к сценариям без их учета. Однако учет электронных спинов может внести гораздо более существенную поправку, так как именно электронные спины определяют состояния многоэлектронных систем, создающие химическую связь.

1.3.1. Задача Коши

Стандартной формой описания эволюции физических систем во времени в классической и в простейшей (без КЭД) квантовой механике является задача Коши. Эта задача состоит в отыскании решения уравнения

$$F(\bar{x}(t), t) = 0 \tag{1.4}$$

при начальном и граничном условиях вида $\bar{x}(0) = \bar{x}_0$ и $\forall t \in \Delta$, если $\bar{x}(t) \in \in \partial D$, то $\bar{g}(\bar{x}(t), t) = 0$, где F — зависящая от времени неизвестная функция вида $D \times \Delta \dashrightarrow H_2$, где $D \subseteq H_1$, Δ — отрезок оси времени, H_1, H_2, H_3 — эвклидовы пространства, ∂D — граница области D, $\bar{x}_0 \in D$, $\bar{g}: \partial D \times \Delta \dashrightarrow \dashrightarrow H_3$ — заданная функция.

Задача Коши состоит в отыскании неизвестной эволюции $\bar{x}$ физической системы, если задан ее закон F, начальное состояние системы $\bar{x}_0$ и режим на границе $\bar{g}$ $(\bar{r}, t)$. Пространство H_1 является обобщенным конфигурационным пространством данной системы. Его смысл в том, что оно образовано из всех возможных координат составных частей рассматриваемой системы. Обобщенное конфигурационное пространство отличается от обычного тем, что в нем есть не только координаты объектов, но и их производные, например, x'_t, x''_{tt}, производные по координатам от решения, и т. п. Закон эволюции F получается в стандартном математическом анализе переходом к пределу из некоторой схемы конечных элементов $S(\delta r)$, зависящей от зерна пространственного разрешения в обобщенном конфигурационном пространстве δr, при $\delta r \to 0$. Поэтому F и $\bar{g}$, вообще говоря, содержит частные производные функции $\bar{x}$ по всем координатам конфигурационного пространства и времени.

Принципиальным свойством квантовой физики является то, что пространства H_1, H_2, H_3 будут гильбертовыми (то есть комплексными пространствами со скалярным произведением; бесконечномерность мы не требуем), а функция F линейна по $\bar{x}$. Это означает, что если некоторые $\bar{x}_1$ и $\bar{x}_2$ являются решениями уравнения (1.4), то для любых (комплексных) чисел λ, μ $\lambda\bar{x}_1 + \mu\bar{x}_2$ также является его решением. Это свойство называется принципом суперпозиции. Мы принимаем этот принцип как фундаментальное положение, относящееся не только к квантовой теории, но и к любой модели, которая будет нами рассматриваться. В дальнейшем мы будем разбирать более общие модели (см. главу 6), но они будут строго опираться на квантовую теорию, и в этом смысле принцип суперпозиции будет в равной мере применим и к ним.

На принципе суперпозиции основана вся алгебра квантовой физики, и он лежит в основе квантовых интерференционных эффектов. Мы можем сказать, что эффективность использования алгебраического аппарата в квантовой физике основана именно на принципе суперпозиции. Это не противоречит использованию нелинейных уравнений, мы только утверждаем, что основные уравнения всегда линейны. Нелинейные уравнения возникают тогда, когда алгебраического языка начинает не хватать, и возникает потребность в использовании более общего понятия алгоритма вместо традиционных формул.

1.3.2. В каких случаях нужно эволюционное моделирование

Создание модели динамического сценария в рамках задачи Коши требует не только точного знания закона эволюции F, но и начальных условий и граничного режима. Все эти три типа данных для сложных систем не могут быть точно определены. Поэтому формат задачи Коши применим только к ограниченному кругу простых систем. Задача Коши называется корректной, если малое изменение F, $\bar{x}_0$ и $\bar{g}$ приводит к малому же изменению решения $\bar{x}$.[11] В противном случае задача будет некорректной. Если в понятие «малости изменения» не входит возможности хоть сколько-нибудь менять закон F, то корректной задачей Коши будет такая задача, у которой все решения устойчивы по Ляпунову. В реальности закон никогда не известен с абсолютной точностью, поэтому понятие корректности более практично.

Закон F не может быть известен с абсолютной точностью, так как является результатом предельного перехода в схеме конечных элементов (в частности, в разностной схеме). При таком переходе актуальным стано-

[11] Я не конкретизирую здесь, что понимается под малостью изменения.

вится механизм действия этого закона на расстояниях, на много порядков меньших рассматриваемого зерна пространственного разрешения δr. Опыт квантовой физики как таковой говорит нам о незаконности такого рода экстраполяций. Точность определения граничного режима никогда не может быть абсолютной в силу того, что сами границы реальной системы не являются четко определенными, то есть мы не можем точно определить, какие частицы в нее входят, а какие — нет. Эта неопределенность еще более подчеркивается существованием так называемых запутанных квантовых состояний, когда состояние пары частиц не сводятся к набору состояний каждой частицы в отдельности. Наконец, начальное условие не может быть точно определено по причинам фундаментального характера. Дело в том, что в квантовой электродинамике административное и реальное времена являются различными понятиями, и потому нельзя считать $\bar{x}_0$ начальным состоянием системы.[12]

Можно было бы на это возразить в том смысле, что эффекты, о которых здесь шла речь, очень малы, и потому не сказываются на результате моделирования. Подчеркну еще раз: это возражение справедливо только в ограниченном числе случаев, которые мы объединили под общим термином простых систем. Такие системы могут состоять из очень большого числа частиц, например, идеальная кристаллическая решетка, проводящая колебания или тепло. Понятие малости изменения в простой системе тоже может иметь широкий смысл. Например, могут быть известны неустойчивые траектории и типы неустойчивостей, границы допустимых изменений F (типа малого коэффициента при старшей производной), и т. п. Простая система характеризуется тем, что эволюция строится в один прием: как решение уравнения при известных краевых и начальных условиях.

Итак, все практически важные задачи, строго говоря, относятся к не простым системам. Такие задачи называют некорректными. Но некоторые из них могут быть удовлетворительно описаны с помощью приближения простыми системами. Мы можем еще расширить понятие простых систем, включив в них такие, для которых модель эволюции можно построить с помощью усреднения сценариев при некотором случайном разбросе начальных и граничных условий, а также закона эволюции в заранее заданных пределах. Такие модели, хотя и не могут быть непосредственно получены как решения задачи Коши, можно свести к задаче Коши с помощью про-

[12]Простая задача об интерференции частицы на нескольких щелях уже требует знания ее начального состояния, которое неоткуда взять. Поэтому квантовая физика дает первопринципные предсказания только для задач, не требующих начальных состояний, например, о спектре и собственных состояниях простых систем; вопросы же динамики всегда должны содержать подгоночные параметры.

стого усреднения. Развитие идеи усреднения приводит к различного вида методам сглаживания кривых.[13]

Собственно, такие методы усреднения можно рассматривать как самую примитивную версию эволюционных методов. Метод усреднения может применяться лишь в том случае, когда нам известны полностью механизмы эволюции (то есть F) и задачу можно свести к решению уравнения (1.4) и исследованию неустойчивых траекторий. Но для по-настоящему сложных систем вся трудность в том, что мы не знаем F. В силу известной нелокальности квантовой физики и принципиального характера релятивизма в КЭД (см. ниже) мы не имеем возможности принципиально отделить не только закон эволюции от граничных условий, но и выделить начальные условия.[14]

Для того чтобы продвинуться в знании F, метод усреднения совершенно не подходит. Более того, он даже ухудшает дело. Рассмотрим простой пример движения двух тел, связанных гибкой веревкой. Допустим, что мы можем наблюдать только за одним из них, тогда как другое остается для нас совершенно невидимым. Мы наблюдаем некое движение единственного тела, похожее на хаотическое, и можем применить к этому движению метод усреднения, который покажет нам, как движется центр масс реальной системы. Поскольку мы не знаем о втором теле, мы вынуждены будем списать хаотичность в движении наблюдаемого нами тела на некий случайный фактор или даже придать этому фактору фундаментальный характер. Но если мы после этого станем изучать идейно не более сложную систему из n тел, связанных последовательно гибкими веревками, из которых m доступно нашему наблюдению, мы не сможем непосредственно применить изученную ранее систему, где можно наблюдать только одно тело, так как в случае m наблюдаемых тел нам придется изучать конкретное воздействие видимых тел друг на друга. Для придания этому случаю большей наглядности предположим, что видимые тела обладают большой массой, а невидимые — малой. Тогда воздействие невидимых в методе усреднения будет истолковано как случайный шум. В любом случае, для открытия за-

[13] К этому типу можно отнести, например, метод регуляризации некорректных задач (см. [67]). Регуляризация является типом сглаживания траекторий реальной некорректной задачи, так же, как и нелинейные уравнения являются ответом на недостатки алгебраического метода теми средствами, которые есть в классической математике. Применение этих средств позволяет привести некорректные задачи к пристойному, с алгебраической точки зрения, виду. Но они в принципе не способны открыть нам хоть какие-то действительно новые явления. Методы типа регуляризации как раз направлены на отсечение этих новых явлений от рассмотрения.

[14] Я уже не говорю о практически непреодолимых трудностях определения начального условия даже в нерелятивистском случае, в особенности при большом числе частиц в системе.

кона упругой силы Гука и понимания того, как ведет себя система из n тел, нужно, чтобы мы могли включить в нашу модель частицы, которые нельзя увидеть непосредственно.

Так же обстоит дело и в квантовой механике. Наивная модель квантовой механики, в которой частицы движутся под действием потенциала, создаваемого другими частицами (но не ими самими — самодействие сразу создает неразрешимые трудности!), совершенно не пригодна для исследования сложных систем, поскольку ее нельзя вполне масштабировать. Действительно, для расчета поля, действующего на каждую из n частиц со стороны других, надо порядка $O(n^2)$ действий, что слишком расточительно для больших систем, где сложность не должна превышать $O(n)$. Но если мы начнем анализировать рассматриваемые системы более детально, включая в них фотоны, создающие поле, запутанные состояния и т. д., мы утратим возможность применять формат задачи Коши! Мы видим, что задача Коши не подходит для анализа сложных систем, и для таких систем необходимо применять метод эволюционного моделирования.[15]

Эволюционное моделирование с использованием экспертизы пользователя дает нам более общий тип моделей. Эволюционные модели в большей мере соответствуют тому, что мы называем конструктивной физикой, так как такие модели допускают фактически разные механизмы для разных размеров зерна пространственного и временного разрешения, что соответствует духу конструктивного математического анализа. Мы убедимся в этом в следующих разделах. Пока же заметим только, что эволюционный принцип позволяет включать в модель новые элементы, проверяя новые гипотезы, и т. д., то есть варьировать жесткие рамки задачи Коши.

1.4. Резюме моделирования динамических сценариев

Эволюционный принцип моделирования динамических сценариев позволяет изучать сложные системы, для которых нельзя применять форму задачи Коши. Такое моделирование явно включает время в качестве административного параметра, что позволяет браться за решение задач нахож-

[15]Пример обхода упомянутой трудности — метод функционала плотности. Здесь мы считаем, что плотность создающей поле частицы одинакова во всех точках ее носителя, и равна ее плотности в точке расположения пробной частицы. Это делается для упрощения расчета, но ведет к большой неточности в случае большой разницы в электронной плотности (например, в атомных задачах метод функционала плотности работает плохо, в задачах, связанных с зонами проводимости — значительно лучше). Но упрощение счета — часто более весомое преимущество, чем точность, и потому метод функционала плотности часто применяется в модельных задачах с многими частицами для суперкомпьютеров.

дения эволюции таких систем, сложность которых не позволяет решить их удовлетворительно с помощью методов усреднения. Эволюционный метод предусматривает накопление информации о сценариях для их последующего использования в построении новых сценариев. Такой подход характерен для квантовой электродинамики: он более универсален, по сравнению с языком сценариев без эволюции. Моделирование динамических сценариев явно требует присутствия пользователя модели, который осуществляет функцию экспертизы получающихся сценариев.

Глава 2

Конструктивная математика

«... к (химической) формуле предъявляют чрезмерные требования: лишь внешне она остается наглядной и вводит при этом в заблуждение, заставляя предполагать наличие таких знаний, которых в действительности не существует.»

В. Хюккель

Самым сильным источником оптимизма при занятии наукой является ощущение ее единства. Это единство должно иметь конкретное воплощение в виде приоритета точных методов перед туманными рассуждениями, что можно сформулировать как господство математического аппарата над всей областью естественных знаний. Постепенный, но неуклонный прогресс математики к концу XIX столетия привел Давида Гильберта к его знаменитой программе, ядром которой был тезис о необходимости аксиоматизации естествознания и оформление его теоретической стороны в виде некой дедуктивной теории. Эта цель выражалась примерно так:

«Сначала мы приведем в порядок математику (то есть докажем ее непротиворечивость и, тем самым, ее абсолютную надежность). Потом мы возьмемся за физику и оформим ее в виде математической теории. Затем то же самое сделаем с химией, а потом и с биологией.»

Эта программа содержала также большое число конкретных, чисто математических задач, которые решались в разное время, но наиболее ценным в программе Гильберта было именно ее ядро, отражающее фактический план завоевания математикой естествознания.

Программа Гильберта потерпела крах уже на первом этапе: она не справилась с самой математикой! В 30-х годах XX века Курт Гедель доказал, что в любой действительно непротиворечивой аксиоматической теории утверждение о ее непротиворечивости невозможно доказать внутри самой этой теории. Это означает, что мы не можем в принципе гарантировать, что простое развитие математики не приведет нас однажды к крушению ее основных частей в форме неожиданно выявленного противоречия. Осознание

действительного смысла результата Геделя пришло не сразу, но повергло многих в шок. Казалось, что математика потеряла статус фундамента, и ничто не сможет вернуть чувство уверенности, которое приходит с точным доказательством теоремы, где каждый шаг абсолютно ясен и не вызывает никаких сомнений.

Для нас важнейшим выводом из крушения гильбертовского плана будет глубокое осознание единства математики с экспериментом. Мы можем сделать из этого только один вывод: эксперимент является необходимой составной частью самой математики, и именно он, в конечном счете, служит источником уверенности в правильности результатов, даже в том случае, когда эти результаты кажутся совершенно абстрактными! Это можно выразить более точно: физика и математика представляют собой единую дисциплину, и их разделение есть не более чем вопрос удобства организации науки, по крайней мере, в докомпьютерную эру. Этот тезис будет очень важен для дальнейшего, и я хочу пояснить его более конкретно. Не существует того, что называют физическим смыслом, не зависимым от математики. Именно математический аппарат определяет, что имеет, а что не имеет физического смысла. Я предлагаю читателю обдумать этот тезис самостоятельно, в надежде, что дальнейшее изложение даст ему дополнительное подтверждение.

Итак, мы видели, что реализация плана аксиоматизации естественных наук даже не дошла до границ настоящей физики. Как мы можем это оценить? Является ли вообще любой план объединения естествознания фикцией, не заслуживающей внимания и усилий? Главным критерием в науке, отличающим ее от иных форм интеллектуальной активности, была ее способность предсказывать наступление того или иного события. Я предлагаю вам сравнить тот уровень надежности предсказаний, который существует в такой хорошо математизированной области, как небесная механика в масштабах Солнечной системы, с предсказаниями, допустим, поведения живого существа, к которому математические методы если и применимы, то в гораздо меньшей степени. Различие будет настолько разительным, что связь степени применения математики и надежности предсказаний станет совершенно очевидной. Фактически, вся теория в естествознании строится вокруг того, чтобы применить математические методы наиболее эффективным способом.

Мы не имеем права отказываться от цели гильбертовской программы, так как это было бы равнозначно капитуляции науки в целом. Бесспорно также, что цель состоит именно в исследовании динамики сложных систем, то есть процессов, формально принадлежащих химии и биологии. Вопрос, следовательно, заключается только в том, чтобы подобрать

подходящие средства для реализации этой программы. Это заставляет нас обратить особое внимание на сам математический аппарат. Может ли аксиоматический метод выполнять возлагаемые на него функции? Этот вопрос является тем более актуальным, что в современной науке речь идет о сложных системах, где ограничения, связанные с результатами типа геделевских, играют принципиальную роль. В действительности, аксиоматический метод дискредитировал себя уже в упомянутом кризисе оснований математики. Нечего даже надеяться на его реабилитацию в применении к реальной физике; он может играть лишь вспомогательную роль, связанную с систематизацией имеющихся знаний, но ни в коем случае не годится в качестве рабочего инструмента теории. Ощущение ненадежности аксиоматического подхода приводит к падению энтузиазма к фундаментальному обоснованию наблюдаемых явлений среди широких масс исследователей и появлению некоторых суррогатных специализированных теорий того или иного эффекта. В любом случае аксиоматический метод связан с резким падением предсказательной силы теории при ее применении ко все более и более сложным системам, так что при приближении к границам биологии эта сила становится практически равной нулю.

Итак, мы видим, что возможности традиционной математики в применении к естествознанию близки к своему исчерпанию. Поэтому актуальной становится идея о модификации математического аппарата, для его применения именно к сложным системам. Здесь надо ясно представлять, что речь идет не о замене математики на философию или тому подобные приемы, а о модификации самой математики, логично вытекающей из того кризиса, в котором она оказалась после геделевских теорем.

Для того чтобы понять огромное преимущество, которое дает такая модификация, мы должны познакомиться с основными положениями математического конструктивизма, которым и предполагается заменить стандартный математический аппарат. Данная глава посвящена математическому конструктивизму. Эта форма математики, появившаяся как ответ на кризис основ, связанный с крахом программы Гильберта. Для нас математический конструктивизм играет ключевую роль, так как именно он будет являться легитимной основой для переформулировки квантовой теории на алгоритмическом языке.

Обзор конструктивизма

Конструктивная математика состоит из конструктивной математической логики, теории алгоритмов, конструктивного математического анализа и конструктивной алгебры. При изучении конструктивизма надо иметь в виду то обстоятельство, что физика и математика представляют собой

одну науку.[1] Уже упоминавшийся мной кризис гильбертовской программы аксиоматизации после теоремы Геделя ясно указал на конструктивизацию как на единственный выход из этого тупика. Конструктивизация основана на урезании формального аппарата теории доказательств. Это урезание позволяет избежать рассмотрения такого понятия, как актуальная бесконечность, заменив его совершенно конкретным алгоритмом, который шаг за шагом выдает значения, стремящиеся к бесконечности в смысле обычного математического анализа. Конструктивизация означает, что мы заменяем абстрактные операции с бесконечностями (например, предельные значения функций в смысле Коши–Вейерштрасса, опять-таки совершенно конкретными манипуляциями с алгоритмами, выдающими их приближения.

Такой поворот означает, что аппарат дедукции, безраздельно господствовавший в классической математике, неизбежно теряет часть своего положения в пользу обращения к опыту, то есть к физическому эксперименту. Это проявляется в том, что поведение алгоритма, в отличие от формулы, нельзя предсказать. Мы можем в формуле, выражающей значения некоторой функции $f(t)$, зависящей от t, подставить $t = +\infty$ и посмотреть, что получится. Но проделать этот трюк с алгоритмом уже не удастся. Даже если некоторый алгоритм A шаг за шагом выдает последовательные значения этой самой функции f, мы, вообще говоря, принципиально не имеем возможности это доказать, имея только текст формальных команд этого алгоритма. И, соответственно, мы не можем предсказать асимптотического поведения этого алгоритма. Работу алгоритма можно только наблюдать, как это делает экспериментатор в физике.

Ограничение процедуры применения математики к реальности формальными доказательствами ведет в тупик по очень ясной причине невозможности полной верификации результатов. Верификация, то есть проверка математического доказательства, является необходимым условием развития самой математики. Она возможна в случае, когда ее сложность существенно меньше сложности построения самого доказательства. В современной математике верхняя граница по объему рукописных страниц для таких доказательств составляет, по-видимому, несколько сотен страниц.[2] Но есть примеры работ, превосходящих две тысячи страниц. Для верификации (и самого построения) таких доказательств необходимо уже использовать компьютерные программы, что вызывает расхождение во мнениях в среде самих математиков.[3]

[1] Эту бесспорную истину до сих пор разделяет лишь меньшинство в обоих станах, хотя многие периодически высказываются в ее пользу (например, В. И. Арнольд).

[2] Эта оценка, конечно, очень груба, она зависит от конкретной ситуации, и я привожу некое среднее значение.

[3] Примером может служить известная задача о четырех красках.

Более того, верификация имеет смысл только в том случае, если ее способны выполнить достаточное количество специалистов.[4] Здесь, как и в статистической физике (да и в самой квантовой механике), чтобы говорить о надежности, надо быть уверенным в возможности (по крайней мере потенциальной) многократного воспроизведения этой процедуры. Сложные доказательства современной математики, по-видимому, подошли к границам такой возможности.

Но здесь есть и другое очень важное обстоятельство. Доказательство как таковое возникло в математике как самый веский аргумент в научных дискуссиях, и его особое место до сих пор связано именно с этим. И здесь диктуемый практикой выбор аксиом часто бывает важнее собственно логической непротиворечивости. Теория может быть противоречивой, но, несмотря на это, очень успешной. Все дело в том, какую длину (сложность) имеет доказательство противоречия. Конечно, никто не захочет пользоваться теорией, в которой утверждается, что $2 \times 2 = 3.9999$. Но если теория обладает несложными аксиомами, дает простое объяснение и предсказание результатов большого числа независимых опытов, а вывод противоречия в ней занимает, скажем, пять тысяч страниц журнального текста, то она завоюет массу последователей, для которых не интересны формальные тексты такой длины, но очень важны как раз данные опыты. Все успешные физические теории именно таковы. Но если речь идет о сложных системах в том смысле, какой мы договорились в это понятие вкладывать, то визуальная демонстрация (по существу, проверка ее аксиом) имеет большую роль, чем формальный вывод следствий вообще. Именно поэтому в естественных науках, изучающих сложные системы (химия и биология), не используются формальные доказательства. Мы можем с достаточной уверенностью утверждать, что для таких систем визуализация компьютерных моделей их поведения будет играть ту роль, которую сейчас играет в физике математическое доказательство. И это будет гигантским шагом вперед, по сравнению с описательным характером этих наук сейчас.

Конструктивизм как раз и указывает нам путь к построению таких систем визуальной демонстрации — с сохранением того уровня строгости, который принят в математике. Это служит исчерпывающим обоснованием законного места конструктивизма в современной физике, а также в системе естественных наук.

Конструктивная математика основана не на понятии множества, как обыкновенная математика, а на понятии алгоритма. Она признает законными только те конструкции, которые можно хотя бы в принципе явно

[4]Представьте себе ситуацию, когда доказательство понимают только двое: сам автор и его ближайший друг.

описать в виде списка определенных инструкций для некоего вычисления. Таким образом, в конструктивной математике нет понятия актуальной бесконечности, а есть понятие потенциальной осуществимости, когда, например, лента машины Тьюринга считается бесконечной в том смысле, что мы всегда имеем возможность, в случае необходимости, добавить к этой (конечной) ленте дополнительные ячейки, по одной, справа.

Алгоритмизация физики опирается на математический конструктивизм в целом, из которого для конструктивной интерпретации теоретической физики самым существенным звеном будет конструктивный математический анализ, описываемый далее. Рабочим инструментом конструктивизма является понятие алгоритма, введенное Тьюрингом, Постом и Марковым-младшим. Оно придало конструктивной математике законченную форму, практически годную для выполнения той роли, которую играет математический аппарат в физике. Математический конструктивизм в XX веке обрел бесспорное право гражданства и давно стал частью математики. Мы же познакомимся с ним, имея в виду совершенно определенную цель — конструктивизацию физики. В настоящее время в ней господствует классическая математика, что приводит к многочисленным нестыковкам и вынужденному «заметанию мусора под ковер». Главное в том, что классическая математика не в состоянии открыть дорогу к пониманию сложных явлений.

Математический конструктивизм не просто служит заменой стандартному формальному аппарату. Он содержит в себе нечто принципиально новое по сравнению со стандартной математикой, и это проявляется уже на уровне конструктивной математической логики. Это новое — фундаментальная идея плюрализма, или множественности истинностных оценок, вытекающая из интуиционистской логики. Идея логического плюрализма совершенно сходна с так называемой многомировой интерпретацией квантовой механики. Эта параллель имеет далеко идущие следствия, которые мы пока еще совершенно не осознали.

Современное развитие квантовой теории вступило в особую область, которую можно назвать зоной конфликта с ее математическим аппаратом. Он заключается в неизбежности выбора: либо должно быть пересмотрено понятие эффективного классического алгоритма, либо модифицирован формализм теоретической физики. Выражением этого конфликта является проект масштабируемого квантового компьютера. Доказанное отсутствие принципиального запрета на его существование [51] означает, что либо такой квантовый компьютер должен быть создан, либо неизбежностью станет замена математического аппарата квантовой теории. Фундаментальность квантовой теории дает основания говорить о пересмотре математического аппарата теоретической физики в целом в том случае, если эксперимен-

ты в области квантового компьютинга не дадут нам убедительных свидетельств в пользу первой гипотезы.

С другой стороны, математический конструктивизм, включающий конструктивные версии логики, алгебры и математического анализа, неполон. В нем отсутствует самое главное звено — конструктивная физика. Соответствующая перестройка квантовой теории не вытекает однозначно из того аппарата конструктивизма, который мы собираемся изучить. Этот аппарат всего лишь задает самые общие понятия для требуемой перестройки (алгоритмы, конструктивные функции, конструктивные алгебраические системы), в то время как от физической теории требуются точные численные предсказания. Для получения физических результатов надо развить прикладной аппарат конструктивизма, то есть построить конкретные алгоритмы, работа которых и даст в итоге численные результаты. Как я уже упоминал, это не может быть продемонстрировано в книге, в отличие от ситуации в стандартной физике, где читатель может проверить все выкладки и сверить расчеты с экспериментальными данными. Поэтому я и не ставлю здесь подобной задачи, — это дело специальных работ. Моя цель — показать полную легитимность физического конструктивизма и реальность его осуществления. Именно так надо трактовать излагаемые ниже подходы к конструктивизации, включая так называемые эвристики конструктивной физики.

2.1. Алгоритмы и вычислимые функции

Мы дадим краткий обзор основных понятий и результатов теории классических алгоритмов, необходимых для понимания дальнейшего.

Главным инструментом конструктивизма является понятие алгоритма. Его физический смысл был выражен А. А. Марковым-младшим в виде следующего тезиса:

Любая реальная эволюция физической системы во времени задается некоторым алгоритмом.

Именно в развитии этого главного тезиса заключается конструктивизация физики.

Алгоритмы применялись в математике с незапамятных времен без всякого определения. Такое определение фактически понадобилось лишь тогда, когда стало нужно доказывать, что некий алгоритм не существует. Однако формальное определение алгоритма после появления компьютеров наполнилось новым смыслом, так как возникла необходимость иметь язык описания алгоритмов, наиболее удобный для их практического создания

и реализации. Такая работа обычно делается программистами, создающими свои программы на различных языках программирования. Для нас формальные описания алгоритмов будут важны и по другой причине: такое описание содержит очень важные детали, позволяющие придавать им черты универсальности, то есть применять один и тот же алгоритм или его часть для моделирования различных явлений. В описании алгоритмов содержатся фактические указания на механизмы физических законов. Эти механизмы, содержащиеся в административной части, не содержатся явно в фильме, и потому не видны пользователю модели.[5] Однако их роль очень важна, так как именно они определяют конкретный способ реализации рассматриваемых нами общих положений и, таким образом, качество моделей динамики.

Известно несколько формализаций алгоритмов, из которых мы рассмотрим только два: машины Тьюринга и клеточные автоматы.

Машины Тьюринга

Машина Тьюринга состоит из входной ленты, головки и набора команд. Входная лента (можно считать ее ограниченной, например, слева, но это не ограничивает общности) состоит из ячеек, в каждой из которых записана одна из букв специального входного алфавита $a_0, a_1, \ldots, a_n$, первая из которых считается пробелом. Лента потенциально бесконечна, то есть к ней можно добавлять, в случае необходимости, любое количество дополнительных ячеек, в которых стоит знак пробела. Головка может обозревать ровно одну ячейку ленты и находиться в одном из состояний головки $q_0, q_1, \ldots, q_k$, первое из которых считается начальным, а последнее — заключительным. Состоянием машины Тьюринга называется все содержимое ее ленты, а также состояние и положение ее головки.[6] Мы будем рассматривать только такие состояния, в которых вся лента, начиная с некоторого места, заполнена одними пробелами. Поэтому можно считать, что состояние машины Тьюринга можно закодировать конечным кортежем из нулей и единиц.

Если x есть слово во входном алфавите, не содержащее пробелов, то под начальным состоянием машины $S_0(x)$ мы будем понимать такое состояние, в котором слово x записано на ленте, начиная со второй ячейки (в первой стоит пробел), и за словом x идут одни пробелы, а головка обозревает первую ячейку ленты и находится в состоянии q_0. Если выполнены

[5] Явное описание этих механизмов называется конструктивной эвристикой.

[6] Головок может быть несколько, лента может быть бесконечной с обоих концов и т. п. — все эти детали не играют существенной роли. Мы уточняем их только ради определенности.

все эти свойства, но головка находится в состоянии q_k, мы обозначаем такое состояние $S_{fin}(x)$ и называем его заключительным.

Команды для машины Тьюринга — это строки вида

$$a_j, q_i \ \rightarrow \ a_J, q_I, (R, L, \emptyset), \tag{2.1}$$

где $j, J = 0, 1, 2, \ldots, n$; $i, I = 0, 1, 2, \ldots, k$, а последним стоит один из символов $R, L, \emptyset$ набора спецсимволов, означающих последовательно: сдвиг головки на ячейку вправо, сдвиг головки на ячейку влево и оставление головки на месте. Такая команда означает: написать в данной ячейке символ a_J, головку перевести в состояние q_I и сдвинуть ее в соответствии со спецсимволом. Набор правил называется программой. Мы будем считать, что программа тоже входит в машину Тьюринга. Мы требуем, чтобы любое сочетание номеров j, i, входящих в указанные диапазоны, встречалось в одной из команд машины Тьюринга. Если по j, i в программе однозначно находится соответствующая команда, мы назовем такую машину детерминированной, в противном случае — недетерминированной.

Вычисление на машине Тьюринга есть последовательность состояний вида

$$S_0, S_1, \ldots, S_T,$$

где $S_0 = S_0(x)$ и $S_T = S_{fin}(y)$ для некоторых слов x, y в алфавите $a_1, a_2, \ldots, a_n$, среди состояний головки в $S_0, S_1, \ldots, S_{T-1}$ нет заключительного и каждый переход $S_j \rightarrow S_{j+1}$ в этой последовательности делается по одной из команд программы данной машины Тьюринга. Если для всех таких слов x, y выполняется равенство $y = f(x)$, где f — некоторая, вообще говоря, не всюду определенная словарная функция, мы говорим, что данная машина Тьюринга вычисляет функцию f. Если через T обозначить данную машину Тьюринга, то f мы обозначаем через f_T. Если при этом f является характеристической функцией некоторого множества слов, мы скажем, что машина Тьюринга вычисляет данное множество. Вычислить данное множество означает иметь алгоритм, который по любому слову определяет, принадлежит оно данному множеству или нет.

Функции, которые вычисляет какая-нибудь машина Тьюринга, называются вычислимыми.

Мы скажем, что машина Тьюринга перечисляет некоторое словарное множество A, если A является образом множества всех слов при отображении f. Иными словами, перечислимое множество есть множество элементов последовательности вида $f(W_1), f(W_2), \ldots$, где $W_1, W_2, \ldots$ есть множество всех слов во входном алфавите без пробела, перечисленное в лексикографическом порядке.

Понятно, что любое вычислимое множество является также и перечислимым. Обратное неверно. Рассмотрим, например, множество пар (код машины Тьюринга T, слово x), таких, что T применима к x, то есть $x \in Dom\ f_T$. Это множество будет перечислимым, так как все такие пары можно перечислить, просто применяя T к x по шагам. Но вычислимым это множество не будет. Действительно, предположим, что оно вычислимо. Будем через $[T]$ обозначать конечный двоичный кортеж, кодирующий машину Тьюринга T. Поскольку число команд в ней конечно, такой код всегда существует. Тогда существует машина T', которая по паре $[T]$, x определяет, применима T к x или нет. Но тогда мы можем построить такую машину Тьюринга T_0, что она применима к числу $[T]$ тогда и только тогда, когда T не применима к $[T]$. Построение такой машины T_0 является рутинной процедурой, использующей наше предположение о существовании машины T'. Теперь посмотрим, применима ли T_0 к своему собственному коду $[T_0]$. Из ее определения вытекает, что любой выбор здесь ведет к противоречию. Таким образом, мы доказали неразрешимость проблемы применимости: не существует машины Тьюринга, определяющей применимость любой другой машины к заданному слову.[7]

2.2. Тезис Тьюринга – Черча – Маркова

Машина Тьюринга является формализацией понятия алгоритма. Если немного потренироваться, можно обнаружить, что любая функция, вычислимая в наивном понимании этого слова, то есть для которой существует некоторый точный рецепт, как из значения аргумента получать значение самой функции, является вычислимой в смысле машин Тьюринга (см. [4, 60, 66, 70]). Однако программирование на машинах Тьюринга не является удобным способом создания программ. Причина в том, что устройство реальных компьютеров далеко от абстрактной схемы с лентой и головкой. Существует много других способов формализации понятия алгоритма. Рассмотрим два из них: нормальные алгоритмы Маркова и клеточные автоматы.

Нормальные алгоритмы Маркова

Они отличаются от машин Тьюринга тем, что вместо ленты рассматривается просто слово A во входном алфавите без пробелов. Головки нет,

[7] Этот метод называется диагональным методом Кантора. Для доказательства несуществования некоторой машины Тьюринга, равно как и для получения нижних оценок в теории сложности вычислений, есть два основных метода: диагональный метод Кантора и использование принципа Дирихле.

а команды имеют вид подстановок $x \to x'$, где x, x' суть слова во входном алфавите без пробелов. На шаге работы нормального алгоритма применяется та из подстановок, для которой первое вхождение слова x в текущее слово A стоит самым первым, и подстановка применяется именно к самому первому слева вхождению x. Определение вычисления дается так же, как и для машин Тьюринга, при условии, что мы выделяем какую-то специальную букву во входном алфавите, играющую сигнальную роль для конца вычисления. Нетрудно понять, что вычислимость в смысле машин Тьюринга будет эквивалентна вычислимости в смысле нормальных алгоритмов Маркова, поскольку положение головки в машине Тьюринга можно легко закодировать, используя специальные сигнальные буквы. Разумеется, при этом надо сузить (или расширить) входной алфавит, так что для работы со словами надо обязательно иметь некоторые специальные символы, не входящие в набор значащих, то есть не встречающихся в словах x и y.

Клеточные автоматы

Клеточные автоматы (см. [44]) дают другую формализацию алгоритмов. Клеточный автомат, как и машина Тьюринга, имеет ленту, в клетках которой стоят буквы входного алфавита. Головки нет. Содержимое каждой j-ой ячейки в любой момент времени t является функцией от ее содержимого и содержимого соседних ячеек в момент времени $t-1$: $a_j(t) = F(a_{j-1}(t - -1), a_j(t-1), a_{j+1}(t-1))$. Так определяется эволюция клеточного автомата. Конец вычисления определяется так же, как и в случае нормальных алгоритмов, появлением сигнальной буквы. Расширяя входной алфавит, мы можем закодировать в состояниях клеточного автомата положение воображаемой головки машины Тьюринга. Поэтому на клеточном автомате можно моделировать работу машины Тьюринга с сохранением времени. Обратное моделирование также осуществляется, но с квадратичным замедлением: головка машины Тьюринга должна пройти всю длину ленты, для того чтобы проделать всю работу, совершаемую за один шаг клеточного автомата.

В отличие от нормальных алгоритмов, которые моделируются машинами Тьюринга (и наоборот) только с линейным замедлением, клеточные автоматы моделируются машинами Тьюринга с квадратичным замедлением: если T — время работы клеточного автомата, то временем работы моделирующей его машины Тьюринга будет T^2. Клеточные автоматы можно аналогично определить на любом дискретном многообразии, в котором надлежащим образом определено понятие соседства клеток.

В любом случае функция, вычислимая в одной из моделей алгоритмов, будет вычислимой также и в любой другой модели. Этот факт верен и для

любых других известных моделей алгоритмов: машин Поста, алгоритмов Колмогорова – Успенского, квантовых компьютеров, и т. д. Если сформулировать это утверждение также и для всех моделей алгоритмов, которые могут быть построены в будущем, получится математический принцип, называемый тезисом Тьюринга – Черча – Маркова: *понятие алгоритма и вычислимых функций едино и не зависит от способа формализации.*

Тем не менее, различные модели алгоритмов имеют свои особенности, которые касаются сложности вычислений. Мы будем в дальнейшем называть конкретную формализацию алгоритмов вычислительной машиной, поскольку нас, в конечном счете, будет интересовать физический аспект работы алгоритмов. Под этим углом зрения мы и будем рассматривать те аспекты алгоритмов, которые формально являются чисто математическими.

Пусть у нас есть некоторое входное слово x и $S_0(x), S_1, \ldots, S_T$ есть вычисление в какой-то модели алгоритмов. Тогда T будем называть сложностью работы данного алгоритма M над словом x и обозначать через $s_M(x)$. Если мы рассмотрим все слова длины, не превосходящей n, то наибольшая сложность работы над такими словами будет считаться сложностью данной машины: $s_M(n) = \max_{x:\ |x| \leqslant n} s_M(x)$. Таким образом, сложность данного алгоритма является функцией натурального аргумента — длины входного слова. Исходя из этого, сложности могут быть линейными, квадратичными, полиномиальными, экспоненциальными и т. д., а также и с более тонкой градацией.[8] Для словарной функции ее сложность вычисления на данном классе вычислительных устройств есть наименьшая возможная сложность работы устройства из этого класса, вычисляющего данную функцию. Для каждой функции f натурального аргумента, достаточно быстро растущей, можно подобрать такую словарную функцию, что ее сложность будет примерно равна f.

Однако классификация задач по сложности их решения не является очень информативной. Кроме того, само определение сложности через наиболее быстрый из алгоритмов, решающий данную задачу, совершенно не конструктивно, поскольку требует, вообще говоря, перебора всех возможных алгоритмов, и выбор из них оптимального. Только в некоторых отдельных случаях можно точно определить сложность той или иной задачи (сложность вычисления множества есть сложность вычисления его характеристической функции). Например, задача сравнения двух слов имеет квадратичную сложность на одноголовочных машинах Тьюринга и линейную — на двухголовочных машинах и клеточных автоматах. Из этого следует, что моделирование клеточных автоматов нельзя ускорить на машинах

[8] Для любой разумной градации можно доказать, что она точна: есть функции именно с такой нижней оценкой сложности [52].

Тьюринга по сравнению с тривиальным методом, дающим квадратичное замедление.[9]

Можно определить отношение на классе вычислимых функций, называемое сведением. Скажем, что словарное множество A полиномиально сводится к множеству B, если существует словарная функция f полиномиальной сложности, такая что $x \in A$ эквивалентно $f(x) \in B$. Тогда если множество B имеет сложность F, то сложность A не превосходит полинома от F. В частности, если B полиномиально вычислима, то таким же будет и A.

Модель вычислений (формализация алгоритмов) называется детерминированной, если вычисление определено однозначно, при задании начального состояния, и недетерминированной в противном случае. Например, квантовые вычисления являются недетерминированной моделью вычислений. Известно, что любая детерминированная модель вычислений полиномиально сводится к любой другой. В частном случае, для машин Тьюринга и клеточных автоматов, мы этот факт установили выше. Таким образом, можно выделить естественный сложностной класс вычислимых функций, не зависящий от модели алгоритмов, а именно класс функций, полиномиально вычислимых на детерминированных моделях. Он обозначается через $\mathcal{P}$.

Теперь обратимся к недетерминированным вычислениям. Недетерминированных вычислений, начинающихся с одного и того же состояния, может быть много. Сложностью недетерминированного вычисления называется число шагов в наиболее коротком вычислении, начинающемся с данного состояния. Понятие вычислимости в недетерминированных моделях будет тем же, что и в детерминированных: набор вычислимых функций и там и здесь одинаков. Но, если бы мы захотели моделировать недетерминированное вычисление на детерминированной машине, мы должны были бы потратить, вообще говоря, экспоненциально большое время. Это справедливо как для недетерминированных машин Тьюринга и клеточных автоматов, так и для квантовых алгоритмов.

Класс множеств, вычислимых на недетерминированных машинах Тьюринга за полиномиальное время, обозначается через $\mathcal{NP}$. Эквивалентным определением класса $\mathcal{NP}$ является следующее. Множество слов A принадлежит классу $\mathcal{NP}$, если существует такое множество B пар слов, принадлежащее классу $\mathcal{P}$, что для некоторого полинома p верно следующее: для

[9] Результат о нижней границе распознавания равенства слов на одноголовочной машине Тьюринга доказывается сведением к принципу Дирихле с помощью учета состояний головки в момент пересечения ею границы первоначального расположения обоих слов на ленте (Барздинь).

любого слова x $x \in A$ тогда и только тогда, когда существует слово y длины, не превосходящей $p(|x|)$ (полинома от длины x), так что $(x, y) \in B$. Доказательство эквивалентности проводится непосредственно исходя из определений. Это второе определение фактически говорит о том, что класс $\mathcal{NP}$ является классом переборных задач: для определения принадлежности слова x множеству из этого класса достаточно произвести перебор всех y достаточно малой длины. При том каждый шаг этого перебора проверяется очень быстро, так как B имеет полиномиальную сложность. Вхождение

$$\mathcal{P} \subseteq \mathcal{NP}$$

следует из определений. Однако проблема $\mathcal{P} = \mathcal{NP}(?)$ до сих пор не решена. Единственный известный общий алгоритм решения переборных задач — это прямой перебор. Это объясняет, почему переборные задачи приравниваются к задачам поиска пароля для черного ящика: мы не можем использовать знание его устройства для подбора пароля. Это утверждение относится к метаматематике, но мы приведем далее один аргумент в его пользу, который не опирается на открытые проблемы.

2.2.1. Вычисления с оракулом

Нет никаких способов решить $\mathcal{NP}$-полные проблемы без помощи прямого перебора. Переборный алгоритм, перечисляющий один за другим все возможные варианты, является фундаментальным алгоритмом, непосредственно связанным с эволюционным методом построения модели динамики. В основе алгоритмизации физики лежит перебор сценариев эволюции, на каждом шаге которого осуществляется экспертная оценка данного сценария. Эта оценка производится пользователем, и она непосредственно влияет на дальнейшее построение сценариев. В теории алгоритмов есть удобная формализация процесса моделирования с участием пользователя-эксперта. Это понятие оракула и вычислений с оракулом.

Рассмотрим некоторое произвольное словарное множество O, которое будем называть оракулом. Переопределим введенное нами понятие вычислимой функции, чтобы получить более общее понятие вычислимости относительно данного оракула. Добавим к возможным элементарным шагам в вычислении (это у нас были применения команд машины Тьюринга) еще специальное действие, называемое обращением к оракулу. Обращение к оракулу заключается в вопросе: принадлежит ли данное слово z к множеству O? После задания такого вопроса вычисление откладывается до того момента, как будет получен ответ. Как только это произойдет, ответ заносится в определенное место на ленте и далее вычисления происходят

в обычном порядке, в частности, они могут генерировать новое слово z', на котором будет задан очередной вопрос к оракулу, и т. д. Момент задания вопроса к оракулу также генерируется в ходе вычисления. Таким образом, мы можем считать, что на входной ленте выделены специальные регистры (группы ячеек), из которых считывается слово z при вызове оракула, другой регистр для записи ответа, а также специальный регистр для определения момента этого вызова. Все ячейки в этих регистрах участвуют в работе алгоритма на общих основаниях, в частности их содержимое может изменяться под действием команд. Оракул можно рассматривать как внешнее устройство по отношению к рассматриваемой вычислительной машине.

Сложность вычисления с оракулом есть число обращений к нему в процессе вычисления. Такое определение сложности получается, если отождествлять сложность с административным временем работы алгоритма, при условии, что время, потраченное на обработку каждого запроса к оракулу, значительно превосходит время выполнения собственных команд вычислительной машины. Иными словами, фактически предполагается, что оракул является объектом гораздо более сложным, чем сама вычислительная машина.

Таким образом, у нас появляется понятие вычислимости относительно данного оракула. Переход к вычислениям относительно оракула называется релятивизацией вычислений. Можно рассматривать классы, аналогичные введенным нами классам $\mathcal{P}$, $\mathcal{NP}$, но определенные для вычислений с некоторым оракулом O. Тогда и проблема $\mathcal{P} = \mathcal{NP}(?)$ окажется релятивизованной относительно данного оракула. Оказывается, что существуют оракулы, для которых релятивизация этой проблемы будет положительно решаемой, и существуют другие оракулы, для которых такая релятивизация даст отрицательно решаемый вопрос. То есть релятивизация может превратить равенство $\mathcal{P} = \mathcal{NP}$ как в верное, так и в ложное.[10] Этот факт имеет большое значение. Он говорит о том, что любое логическое рассуждение, в котором вместо вычислимости можно подставить относительную вычислимость без ущерба для логической строгости, не может быть использовано для решения проблемы $\mathcal{P} = \mathcal{NP}(?)$ ни в положительном, ни в отрицательном смысле. Все известные к настоящему времени логические конструкции, оперирующие с понятием вычислимости как таковым, допускают такую подстановку. Поэтому такие конструкции нельзя использовать для решения этой открытой проблемы. Есть свидетельства в пользу того,

[10]Известен результат Гила и Соловея, согласно которому при выборе оракула случайным образом с вероятностью 1 окажется, что он дает отрицательную релятивизацию проблемы $\mathcal{P} = \mathcal{NP}(?)$.

что утверждение $\mathcal{P} = \mathcal{NP}$ вообще является независимым от аксиом арифметики, что, впрочем, также не доказано.[11]

Класс всевозможных оракулов имеет мощность континуума, в то время как класс вычислимых (без оракула) множеств является счетным, подавляющее большинство оракулов представляют собой невычислимые множества. Поэтому и вычислимость относительно таких оракулов является более широким понятием, чем простая вычислимость.

Физический аспект алгоритмов содержит явное указание на то, что оракул надо рассматривать как устройство столь сложное, что мы отказываемся от его анализа и рассматриваем его как черный ящик. Это в точности соответствует нашему разделению модели на пользовательскую и административную часть. **В конструктивизме под оракулом понимается пользователь компьютерной модели.** Пользователь принимает участие в построении окончательной модели динамики вместе с вычислительной машиной. При этом его участие в виде экспертных оценок следует рассматривать как вопросы к оракулу в теории алгоритмов.

Как эта абстрактная модель должна применяться в физике? Следуя тезису Маркова, мы принимаем, что реальность является работой некоторой абстрактной вычислительной модели. Тогда человек, производящий эксперимент, является пользователем такой модели. Мы приходим к следующему выводу.

Экспериментатор формально представляется в конструктивизме как оракул для рассматриваемой им реальной системы.

Этот тезис конструктивизма принципиально важен для дальнейшего. Он выражает то, что обычно называется свободой воли экспериментатора. Например, если исследуется поток фотонов, экспериментатор может избрать любую возможную ориентацию фотодетектора, причем этот выбор никоим образом не диктуется рассматриваемой системой.

Мы видим, что теория алгоритмов дает формальный аппарат для построения физической модели, роль которого (как всякого математического аппарата) состоит в упорядочении рассмотрения. Таким образом, при описании моделирующих алгоритмов надо стремиться к формализации экспертных оценок, и такая формализация является универсальным инструментом алгоритмики. Фактически, описываемые нами в дальнейшем приемы будут нацелены именно на такую формализацию.

[11] Мы видим трудности, к которым приводит аксиоматический метод, применяемый в теории алгоритмов. Эти трудности проявляются не только в теории алгоритмов, но и во всей математике в целом. Более подробное обсуждение читатель может найти в монографиях, посвященных судьбе программы Гильберта в свете теорем Геделя (например, в [39]).

2.3. Конструктивная математическая логика и квантовая теория

Мы рассмотрим так называемую конструктивную математическую логику, играющую в конструктивной математике ту же роль, что и обычная математическая логика играет в стандартной математике.

Исторической основой математического конструктивизма является область математической логики, называемая интуиционизмом. Суть интуиционизма состоит в том, что в нем нет закона исключенного третьего, то есть логическая формула «A или не A» не является в интуиционизме аксиомой. Для доказательства такой формулы надо либо доказать A, либо доказать не A. Модели интуиционистских теорий известны как модели Крипке. Эти модели устроены как последовательности обычных моделей, только с трехзначной логикой, где наряду с обычными истиной и ложью есть еще и третье логическое значение — неизвестность. Эта неизвестность может быть уточнена в дальнейших элементах данной последовательности. Мы видим здесь прямую аналогию с типичной ситуацией в квантовой механике, когда мы не знаем результата измерения системы, находящейся в квантовом состоянии.[12]

Мы также видим в моделях Крипке прямую аналогию с динамическими моделями, состоящими из сценариев, и генетическим методом построения таких моделей. Я думаю, что возможно формальное определение динамических моделей с использованием аппарата моделей интуиционистских теорий, это является интересной темой, относящейся к математической логике, и мы не будем на ней останавливаться.[13]

2.3.1. Стандартная математическая логика

Основой математической логики является логика высказываний. Центральным понятием в ней является понятие логической формулы. Определение формулы индуктивно и выглядит так.

Базис. Всякая булевская переменная из множества $\{\alpha_1, \alpha_2, \ldots\}$ является формулой.

Шаг. Если A и B — формулы, то выражения $(A\&B)$, $(A \text{ or } B)$, not A также являются формулами.

[12]Эта аналогия побудила фон Неймана и некоторых других исследователей заняться таким предметом, как квантовая логика, привлекая для этой цели аппарат интуиционизма. Справедливости ради надо заметить, что аксиоматический метод, похоронивший первоначальную программу Гильберта, и здесь оказался почти бесплодным, если не считать обоснования принципиальной идеи плюрализма.

[13]На эту тему есть несколько работ, которые интересующийся читатель может найти в [43].

Истинностное значение формулы при фиксации всех входящих в нее переменных определяется по индукции на основе стандартных правил для элементарных булевских функций «и», «или» и «не». Следующее базисное понятие — логический вывод, называемый исчислением высказываний. Исчисление высказываний удобнее формулировать не на языке формул, а на языке так называемых секвенций. Секвенция — это строка вида

$$A_1, A_2, \ldots, A_n \ \rightarrow \ B_1, B_2, \ldots, B_k,$$

где $A_1, A_2, \ldots, A_n$ — последовательность формул, называемая антецедентом, а $B_1, B_2, \ldots, B_k$ — последовательность формул, называемая сукцедентом. Интуитивный смысл секвенции такой: если истинны все формулы антецедента, то выполнена хотя бы одна формула сукцедента. То есть формулы в антецеденте объединены связкой «и», а формулы в сукцеденте — связкой «или». Аксиомами исчисления высказываний называются секвенции вида $A \rightarrow A$. Правила вывода позволяют получать новые секвенции из уже доказанных. Они таковы:

1) Перенос формулы: от секвенции $\ldots, A, \ldots \rightarrow \ldots$ или $\ldots \rightarrow \ldots, A, \ldots$ можно перейти к $\ldots, \ldots \rightarrow \text{not } A, \ldots$ и $\ldots, \text{not } A \ldots \rightarrow \ldots$ соответственно, где многоточиями выделены не изменяемые наборы.

2) Введение конъюнкции или дизъюнкции: от секвенции $A_1, A_2, \ldots \rightarrow \ldots$ или $\ldots \rightarrow \ldots, B_1, B_2$ можно перейти к $(A_1 \& A_2), \ldots \rightarrow \ldots$ или $\ldots \rightarrow \ldots, (B_1 \text{ or } B_2)$ соответственно. От секвенций $A_1, \bar{B} \rightarrow \bar{C}$ и $A_2, \bar{B} \rightarrow \bar{C}$ можно перейти к $(A_1 \text{ or } A_2), \bar{B} \rightarrow \bar{C}$, а от $\bar{B} \rightarrow \bar{C}, A_1$ и $\bar{B} \rightarrow \bar{C}, A_2$ — к $\bar{B} \rightarrow \bar{C}, (A_1 \& A_2)$ (верхней чертой обозначены наборы формул).

3) Перемешивание: формулы внутри сукцедента (антецедента) можно поменять по порядку, сокращать повторяющиеся формулы, а также вводить двойники отдельно в сукцеденте и в антецеденте.

4) Сечение: из $\bar{D}, A \rightarrow \bar{B}$ и $D_1 \rightarrow A, \bar{E}$ можно вывести $\bar{D}, D_1 \rightarrow \bar{B}, \bar{E}$.

Известна теорема об устранении сечений в логике высказываний, согласно которой если формула выводима с использованием сечения, то она выводима и без использования сечений. Однако сечения играют существенную роль в исчислении предикатов, которое мы сейчас кратко рассмотрим.

Введем в язык функциональные символы $f_1, f_2, \ldots, f_n$ и предикатные символы $g_1, g_2, \ldots, g_k$. Эти наборы называются сигнатурой теории. Определим понятие терма (сложной функции) индукцией.

Базис. Всякая переменная $x_1, x_2, \ldots$ есть терм.

Шаг. Если $t_1, t_2, \ldots, t_m$ — термы, f_i есть m-местный функциональный символ, то $f_i(t_1, t_2, \ldots, t_m)$ есть терм.

Теперь рассмотрим исчисление высказываний, в котором роль логических переменных α_j играют формулы вида $(t_1 = t_2)$ и $g(t_1, t_2, \ldots, t_m)$,

где $=$ есть специальный знак равенства, а g есть m-местный предикатный символ.

Введем в качестве дополнительных аксиом секвенции следующего вида:

$$(t_1 = t_1'), \ldots, (t_m = t_m') \to (f(t_1, t_2, \ldots, t_m) = (f(t_1', t_2', \ldots, t_m'));$$
$$(t_1 = t_1'), \ldots, (t_m = t_m'), g(t_1, t_2, \ldots, t_m) \to g(t_1', t_2', \ldots, t_m');$$
$$(t_1 = t_2),\ (t_2 = t_3) \to (t_1 = t_3);$$
$$(t_1 = t_2) \to (t_2 = t_1).$$

Наконец, введем специальные значки $\forall$, $\exists$, называемые кванторами всеобщности и существования, и обобщим понятие формулы введением следующих возможностей в индуктивном шаге в построении формул. Если $A(x)$ есть формула со свободной переменной x, то выражение $\exists x\ A(x)$ и $\forall x\ A(x)$ — формулы, в которой переменная x связана (не свободна). Правила подстановки термов вместо свободных переменных в формулу определяются естественным образом. Мы записываем через $A(t)$ результат подстановки терма t вместо свободной переменной x в формулу A.

Теперь введем дополнительные правила вывода, касающиеся кванторов.

1) Если t — терм, а x — переменная, нигде ранее не встречавшаяся, то из $\bar{D}, A(t) \to \bar{C}$ можно вывести $\bar{D}, \forall x\ A(x) \to \bar{C}$, из $\bar{D} \to A(t), \bar{C}$ можно вывести $\bar{D} \to \exists x\ A(x), \bar{C}$.

2) Если переменная x не встречается нигде в секвенции, кроме отмеченного места, то из формулы $\bar{D},\ A(x) \to \bar{C}$ можно вывести $\bar{D},\ \exists x\ A(x) \to \to \bar{C}$, а из $\bar{D} \to A(x), \bar{C}$ можно вывести $\bar{D} \to \forall x\ A(x), \bar{C}$.

Немного подумав, можно понять, что введенные правила вывода в точности соответствуют естественному смыслу символов $\forall x\ A(x)$ и $\exists x\ A(x)$, если понимать первый как конъюнкцию всех возможностей: $A(x_1)\&A(x_2)\&\ldots$, а второй — как дизъюнкцию всех возможностей: $A(x_1)$ or $A(x_2)$ or $\ldots$.

Получившаяся логическая система называется исчислением предикатов. Здесь теорема об устранении сечений не имеет места. Но справедлив ее аналог, состоящий в том, что любую выводимую секвенцию можно вывести, применяя сечения только к формулам A вида $(t_1 = t_2)$ где $t_1,\ t_2$ — термы.

Правила вывода дают возможность получать теоремы из уже доказанных теорем, если начать с аксиом. Мы скажем, что формула A выводима, если выводима секвенция $\to A$.

Моделью, или алгебраической системой данной сигнатуры называется множество индивидов, на которых определены каким-то образом все функ-

ции и предикаты данной сигнатуры (n-местный предикат определяется как n-местная булева функция, так что мы полагаем данный предикат истинным в точности на тех кортежах, где она равна единице). Истинность формулы логики предикатов в данной модели определяется естественным путем. Формула называется тождественно истинной, если она истинна в любой модели данной сигнатуры. Имеет место первая теорема Геделя (о полноте), гласящая, что выводимы те и только те формулы, которые тождественно истинны. Эта теорема означает полную эквивалентность понятия выводимости и понятия тождественной истины, что и служит подтверждением того, что изложенное нами построение логических теорий с помощью аксиом и правил вывода является единственно возможным.

2.3.2. Проблема непротиворечивости логических теорий

В классической математической логике основным вопросом традиционно считается вопрос о непротиворечивости математической теории. Теория называется непротиворечивой, если существуют формулы в ее сигнатуре, не являющиеся теоремами. В противном случае теория называется противоречивой. Если в теории можно доказать для какой-либо формулы A как ее саму, так и ее отрицание $\mathrm{not}\ A$, то такая теория будет противоречивой, что доказывается последовательным применением правил переноса и сечения. Интерес представляют такие теории, сигнатура которых позволяет записывать формулы, соответствующие утверждениям арифметики, например, кодировать строки символов, утверждать простые факты о их структуре, и т. д. Это становится возможным с применением термов и равенства. В частности, мы будем считать, что в рассматриваемых нами теориях можно записывать такие утверждения: «данная строка символов представляет собой текст доказательства некоторой теоремы в данной теории». Построение, скажем, в самой арифметике со сложением и умножением такого рода формул является хотя и трудоемкой, но совершенно рутинной задачей, и я отсылаю читателя к любому достаточно подробному учебнику по математической логике, в которых это проделано детально (например, [39]).

Тогда в сигнатуре данной теории можно записать утверждение такого вида:

«Данная теория непротиворечива».

Эта формула имеет такой вид:

$$\mathrm{not}\ \exists D\ (\mathrm{proof}\ (D) \& \ \mathrm{fin}(D,\ (2 \cdot 2 = 5)),$$

где $\mathrm{proof}\ (D)$ — формула, утверждающая, что текст D является доказательством, а $\mathrm{fin}(D,\ C)$ означает, что текст D кончается логической формулой C. Утверждение о непротиворечивости данной теории $\mathcal{T}$ обозначается через $\mathrm{Consis}_{\mathcal{T}}$.

Теорема Геделя о доказательствах непротиворечивости утверждает, что если в теории $\mathcal{T}$ выводима формула $\mathrm{Consis}_{\mathcal{T}}$, то эта теория противоречива. То есть если средствами некой логической теории может быть доказана непротиворечивость ее самой, то в ней можно доказать вообще все что угодно, то есть такая теория ни на что не годится.

Если мы хотим ввести в теорию $\mathcal{T}$ утверждение о ее непротиворечивости $\mathrm{Consis}_{\mathcal{T}}$, то у нас получится уже другая теория $\mathcal{T}_1$, и для нее будет другое утверждение о непротиворечивости $\mathrm{Consis}_{\mathcal{T}_1}$, и т. д. То есть вопрос о непротиворечивости логических теорий не может быть решен в рамках этих теорий. Такой факт сразу делает аксиоматический метод ненадежным. Осознание этого факта привело к кризису в математике, послужившему толчком к появлению конструктивизма.

Это в полной мере относится к физическим теориям, поскольку они опираются на математический формализм. Аксиоматический метод страдает неустранимым изъяном, и его нельзя применять вне связи с тем, что называется здравым смыслом, или интуицией. Если этот метод не подкреплен интуицией, он может завести научные исследования в тупик. Но именно в квантовой теории интуиция особенно слаба. Многие утверждения квантовой механики прямо противоречат интуиции, и поэтому роль формализма здесь очень велика. В рамках классической математики невозможно выделить действительно необходимую часть формализма, к чему постоянно, хоть и не всегда осознанно, стремятся физики. Понятие актуальной бесконечности, лежащее в основе стандартного математического анализа, с необходимостью требует именно аксиоматического подхода, так как это понятие в принципе не допускает никаких эффективных процедур.

Только конструктивизм, основанный на эффективных процедурах, свободен от этого недостатка.

2.3.3. Конструктивная математическая логика

Стандартная математическая логика не вполне подходит для основания конструктивной математики. Для этой цели существует специальная, конструктивная математическая логика, которую еще называют **интуиционизмом**. Интуиционизм не оперирует непосредственно с алгоритмами, но он формулирует логические правила, по каким можно работать с логическими формулами конструктивной математики.

Рассмотрим один из главных экспериментов, лежащих в основе квантовой теории — интерференцию одной квантовой частицы при прохождении сквозь две щели в экране. Мы хорошо знаем, что интерференционная картина для этого эксперимента не может быть получена простым сложением картин при прохождении частицы сквозь одну и другую щели в отдельности. Пусть логическая формула A означает, что частица прошла через первую щель, а формула B означает, что она прошла через вторую щель. Тогда прохождение частицы через две щели можно выразить логически с помощью формулы $(A \text{ or } B)$. Именно в этом состоит трактовка эксперимента по прохождению через пару щелей с точки зрения классической физики, которая рассматривает частицу как точечную. Иными словами, если мы детектируем частицу за экраном, мы делаем вывод, что она прошла через одну из щелей, то есть имеет место формула $(A \text{ or } B)$.

В квантовой физике ситуация немного иная. Появление частицы за экраном не означает, что она прошла либо через первую, либо через вторую щель, это вообще особое событие, связанное со щелями неким специальным способом. Здесь прохождение частицы (как точечной) через одну из щелей тоже выражается формулой $(A \text{ or } B)$, но для того чтобы убедиться в этом, мы должны уметь ответить на вопрос о том, через какую именно щель прошла частица! То есть для доказательства формулы $(A \text{ or } B)$ в квантовой физике надо детектировать частицу в момент прохождения через экран, что неминуемо приведет к ее наблюдению либо в первой, либо во второй щели и, разумеется, испортит всю интерференционную картину.

Так вот, в конструктивной математической логике все обстоит именно так, как в квантовой теории. Доказать формулу $(A \text{ or } B)$ можно только двумя способами: либо надо доказать A, либо надо доказать B. Никакого другого способа доказательств дизъюнкции конструктивизм не признает. Из этого, в частности, следует глубокий вывод: формулу $(A \text{ or not } A)$ в конструктивизме можно доказать, только либо доказав A, либо доказав $\text{not } A$. То есть в конструктивизме не существует закона исключенного третьего! На первый взгляд, это — недостаток конструктивизма. Но надо помнить, что уметь многое доказывать — не всегда благо. Сила вывода в квантовой механике прямо противоречит природе, как в случае эксперимента с двумя щелями, где принятие $(A \text{ or } B)$ исключает интерференционную картину. Таким образом, именно конструктивная математическая логика наилучшим образом соответствует квантовой физике. Это было осознано еще фон Нейманом, который пытался построить всю квантовую теорию на основе интуиционизма. Эта попытка не имела особого успеха, несмотря на абсолютно правильную идею, лежащую в ее основе: показать, что интуиционизм является истинной логикой квантовой теории. Пионерская работа

Дж. фон Неймана и Г. Биркгоффа [9] не имела большого продолжения из-за сложности проблемы перевода квантовой физики на рельсы конструктивизма, что требует также замены стандартного математического анализа на конструктивный. Дело не может быть решено простой заменой логики, поскольку параллельно должна быть изменена фактически интерпретация всех вычислительных приемов, практикуемых в теоретической физике.

Сформулируем те изменения в языке исчисления высказываний, которые необходимы для перехода от классического исчисления к интуиционистскому. Это изменение одно, и оно предельно просто. Логические секвенции теперь будут иметь вид

$$A_1, A_2, \ldots, A_n \to (B). \tag{2.2}$$

То есть в сукцеденте может стоять не более одной формулы. Это простейшее синтаксическое условие — запрет на расщепление сукцедента дает нам интуиционистское исчисление высказываний взамен классического. Все остальные правила вывода и аксиомы полностью сохраняются. В этом исчислении уже нельзя вывести правило исключенного третьего, как в классическом исчислении, именно из-за определения секвенций вида (2.2).

Таким образом, интуиционистская логика высказываний имеет, по существу, тот же арсенал правил вывода, что и классическая логика высказываний, и ограничение, накладываемое интуиционизмом на логику, не должно затрагивать принципиальных вещей. Эта догадка полностью подтверждается точными теоремами. А именно, существует так называемая интерпретация классической математической логики в терминах конструктивной, сохраняющая логический вывод. Это означает, что существует такой перевод формул вида

$$\mathrm{Trans} \ : \ A \to [A],$$

где A — формула классической логики, $[A]$ — соответствующая ей формула конструктивной логики, называемая ее конструктивной интерпретацией, так что в классической логике выводима A тогда и только тогда, когда в интуиционистской логике выводима $[A]$. Этот результат (см. [24, 63]) говорит о том, что классическая и интуиционистская логики являются равно непротиворечивыми. Если в одной из них обнаружилось бы противоречие, то оно было бы и в другой.

Точно так же, как и в случае классической логики, к интуиционизму можно добавить аксиомы арифметики или теории множеств и получить конструктивные версии этих логических теорий. В конструктивной логике можно доказать теорему, аналогичную первой теореме Геделя, но только для конструктивной логики определение моделей будет иным, это будут

модели Крипке. Модель конструктивной логики будет содержать параметр, который можно назвать временем t. Разделение логических формул на ложные и истинные будет зависеть от значения t. В каждый момент времени формулы будут подразделяться на истинные, ложные и не определенные. Если для первых двух типов истинностные значения являются установленными к этому моменту времени, то для не определенных формул мы считаем, что их истинностные значения в момент t еще не установлены. В следующие моменты $t_1 > t$ для не определенных формул могут быть установлены новые истинностные значения. Мы не будем здесь приводить точного определения интуиционистских моделей Крипке. Ограничимся только замечанием о том, что такие модели в большей мере соответствуют логике квантовой теории, чем обыкновенные.

В конструктивной математике к истинным высказываниям предъявляются большие требования, чем в классической. Это связано с более жесткими требованиями к логическому выводу, которые имеются в конструктивизме. Здесь нужно предъявить явные алгоритмы построения требуемых объектов, а не просто доказать, что несуществование таких объектов ведет к противоречию, как в классической математике.[14] Ясно видно, что эта особенность конструктивизма полностью соответствует ситуации в квантовой теории. В квантовой механике многие физические величины не имеют определенных значений, но могут получить их в дальнейшем, в результате проведенной над рассматриваемой системой наблюдения. Более того, главные физические величины — заряд и масса частиц — могут иметь немного разные значения в зависимости от сценария, в котором они рассматриваются, то есть в зависимости от своего индивидуального окружения (перенормировка заряда и массы). Это подтверждает мысль о том, что конструктивизм внутренне присущ квантовой теории. Поэтому оформление квантовой физики в конструктивную форму является глубоко обоснованным шагом.

2.3.4. Идея плюрализма и ее значение для физики

В конструктивной математической логике содержится нечто значительно более важное, чем правила для логических процедур. Это — фундаментальная идея логического плюрализма. Я специально остановлюсь на ней, поскольку она имеет большое значение для физики.

Как известно из предыдущего параграфа, вопрос о непротиворечивости логической теории не может быть решен в пределах самой этой теории.

[14] Речь идет о тех самых доказательствах чистого существования, которые так раздражают физиков и которые составляют предмет гордости классической математики. Конструктивная математика свободна от этих излишеств.

Поэтому практическое значение приобретает вопрос об условной непротиворечивости. Если мы верим, что некая теория непротиворечива, то из этого иногда можно сделать совершенно строгое заключение о непротиворечивости другой теории. Посмотрим с этих позиций на классическую и интуиционистскую логики. Поскольку интуиционистская логика является по определению сужением классической, то непротиворечивость классической логики сразу гарантирует непротиворечивость логики конструктивной. Верно ли обратное утверждение?

Ответ, как мы знаем, утвердительный. Существует перевод текстов вида

$$D \to \tilde{D}, \tag{2.3}$$

такой, что если текст D является доказательством в классической логике, то текст $\tilde{D}$ является доказательством в логике конструктивной. Из этого следует условная непротиворечивость классической логики: она непротиворечива, если непротиворечив интуиционизм. Именно этот путь обоснования классической математики и имелся в виду Брауэром и другими сторонниками интуиционизма. Конструктивная математическая логика обладает большей интуитивной убедительностью, чем классическая, отсюда и происходит ее название. Интуиционизм требует от доказательства конкретных процедур построения искомого объекта, а не просто констатации того, что такого объекта не может не существовать. В интуиционизме не признается стандартная схема классической математики: «предположим, что такого объекта нет и придем к противоречию...». То есть конструктивная логика обладает большей степенью надежности как раз с физической точки зрения, особенно в свете теоремы Геделя о доказательствах непротиворечивости. Так вот, упомянутая теорема означает, что эта высокая степень надежности конструктивизма может быть в некотором смысле перенесена и на классическую логику![15]

Но для того чтобы этот перенос осуществить реально, нужен перевод текстов вида (2.3), а он определен неоднозначно. Это является одним из проявлений множественности логических оценок, присущих конструктивизму. Другим проявлением этой множественности является неопределенность истинностных значений формул до некоторого момента времени, как в моделях Крипке. Таким образом, конструктивизм обладает встроенным свойством плюрализма истинностных оценок: такие оценки в нем могут зависеть от времени и от способа интерпретации в нем классической логи-

[15]Тем не менее, в интуиционизме есть та же проблема доказательства непротиворечивости, что и в классической логике. Таким образом, интуиционизм, вопреки надеждам фон Неймана, не может служить единственной надежной основой конструктивной физики.

ки. Важно отметить, что этого свойства конструктивной логики невозможно избежать. Его надо воспринимать как неизбежную плату за удобства, предоставляемые конструктивизмом, а именно, эффективность всех процедур нахождения объектов и вытекающую из этой эффективности большую уверенность в надежности логических выводов, чем в классической математике.[16]

Фундаментальное свойство плюрализма конструктивной математической логики имеет большое значение для физики. Плюрализм указывает на существование границ применимости физических теорий и, в особенности, на границы применимости основных физических концепций. Речь идет, прежде всего, о концепции неотличимости, или идентичности элементарных частиц, позволяющей применять в квантовой механике методы матричной алгебры. Идентичность элементарных частиц существенным образом используется в формализме чисел заполнения, что дает возможность записывать физические операторы в компактной форме. Наша работа по конструктивизации физики, разумеется, нуждается в вычислительных приемах такого рода. Поэтому мы и не собираемся расставаться с представлением о эквивалентности элементарных частиц одного типа. Однако статус такого представления в конструктивной физике ограничен фундаментальным свойством плюрализма, то есть он ниже, чем фундаментальный закон природы. Это означает, что представление об эквивалентности однотипных элементарных частиц не принадлежит новому формализму, а является просто удобным предположением для построения моделирующих алгоритмов в известных нам случаях. Это предположение связано с удобством, и от него можно отказаться в том случае, когда это будет необходимо. Возможность отказа от представления о тождественности частиц не может считаться принципиальным шагом в том случае, если мы делаем выбор в пользу конструктивизма. Поэтому это представление о тождественности в конструктивизме нельзя трактовать как концепцию.[17]

Представление об идентичности однотипных частиц (например, электронов) обусловлено только тем, что оно позволяет легко строить моделирующие динамику алгоритмы в известных нам случаях, то есть в тех задачах, где мы игнорируем возможность сложных запутанных состояний

[16]Эта уверенность все-таки не абсолютна, из-за сохранения геделевской конструкции. Единственный формально корректный путь здесь — в разделении модели на пользовательскую и административную части и явное введение пользователя в качестве оракула.

[17]Связь типов элементарных частиц с неприводимыми представлениями группы Пуанкаре не может служить обоснованием того, что идентичность однотипных частиц есть фундаментальный закон. Можно всегда предположить, что частицы внутри одного типа имеют индивидуальности, связанные с разным окружением. Подобное предположение в конструктивной физике является вопросом эффективности моделирующего алгоритма, а не аксиомой.

многих частиц. С этим опытом связана традиция, по которой мы сохраняем представление об идентичности. Для нарушения такой традиции необходима ситуация, при которой вычислительную выгоду давало бы разделение частиц на более мелкие группы или, наоборот, их объединение в большие.[18] Возможную форму для этого предоставляет метод коллективного поведения, который описан в следующей главе. Одна квантовая частица представляется здесь как ансамбль, состоящий из ее экземпляров. Это дает, в принципе, возможность наделять экземпляры индивидуальными свойствами, то есть реализовывать именно ту субструктурность, которая имеется в виду при возможном отказе от представления об идентичности элементарных частиц. Отказ от этого представления может давать очень серьезную выгоду в случае, когда речь идет о динамических сценариях для сложных систем, и мы еще вернемся далее к этой возможности. Пока же констатируем, что идентичность частиц мы сохраняем ради тех видимых удобств, которые дают нам имеющиеся алгоритмы моделирования.

2.4. Конструктивный математический анализ

Алгоритмический подход к физике обладает полной преемственностью по отношению к традиционному. Это связано с тем, что алгоритмы здесь применяются к стандартному инструментарию теорфизиков — математическому анализу. Нам нужна такая алгоритмизация математического анализа, которая бы сохранила в неприкосновенности его вычислительную часть — то, что только и существенно для физики. В стандартном матанализе Коши–Вейерштрасса есть еще абстрактная часть, где существуют такие объекты, как теоретико-множественные проблемы, возможность выбора разной аксиоматики и тому подобные вещи, в физике не применяемые. Этой частью можно (и даже необходимо) пожертвовать при алгоритмизации матанализа. Такой инструмент уже создан, и он называется конструктивным математическим анализом. Данный раздел является кратким введением в эту необходимую для нас область.[19]

2.4.1. Конструктивные вещественные числа

Известно, что числа бывают (в порядке вложенности множеств): натуральными, целыми, рациональными, алгебраическими и трансцендентными. Конструктивизм вводит между двумя последними классами еще один класс — конструктивные вещественные числа.

[18]Примером последней ситуации является введение понятия изоспина в ядерной физике.

[19]Интересующийся читатель может подробнее познакомиться с этим предметом по книге [57].

Кратко говоря, конструктивное вещественное число — это такое число, которое является пределом последовательности рациональных чисел $r_1, r_2, \ldots$, которая генерируется некоторым алгоритмом. Понятно, что всякое алгебраическое число является конструктивным, поскольку решения уравнения с целыми коэффициентами можно сколь угодно точно приблизить рациональными числами, причем каждое последующее приближение получается из предыдущего совершенно определенной, конструктивной процедурой. Есть и примеры трансцендентных чисел, которые являются конструктивными, например, e, π, а также любые алгебраические комбинации этих чисел, константа Эйлера, о которой вообще не известно, является ли она рациональной, и т. д.

Вообще, все используемые в вычислениях вещественные числа являются конструктивными, что позволяет говорить о том, что этот класс чисел достаточен для построения конструктивного аналога матанализа. Тем не менее, множество конструктивных чисел счетно, так что абсолютное большинство вещественных чисел конструктивными не являются. То есть конструктивный матанализ может принципиально отличаться от обыкновенного (и отличается от него), по крайней мере, если мы используем для его описания ту же логическую теорию.[20]

Оказывается, что это действительно так и есть. Для «обычных» вещественных чисел можно использовать равенства вида $x = y$, не заботясь о том, как их фактически проверить. Что получится, если x и y — конструктивные числа? Пусть, например, число x задано простым алгоритмом, выдающим его приближения только в виде $0, 0, \ldots$, что мы видим просто по структуре этого алгоритма. А y задается неким сложным алгоритмом. Можем ли мы эффективно проверить равенство $x = y$? Пусть T — какой-либо алгоритм, а n — произвольное число. Мы построим алгоритм, задающий последовательные приближения y так: на каждом шаге j производим j шагов T при его работе над n, и если он не закончил работу, полагаем очередное приближение y равным $1/j$, а если закончил впервые на шаге s, то полагаем все последующие приближения y равными $1/s$. Из этого

[20]Известно, что всякая непротиворечивая теория со счетной сигнатурой имеет не более чем счетную модель. Сигнатура (набор элементарных символов) математического анализа — счетна, и потому счетная модель есть и у стандартного математического анализа, в формализации, например, Цермело – Френкеля. Спрашивается, а что же означает тогда несчетность множества вещественных чисел? Она означает просто отсутствие в данной счетной модели функции, устанавливающей взаимно-однозначное соответствие между тем, что играет в модели роль вещественных чисел, и натуральным рядом. В более широкой модели такая функция есть, но это не играет никакой роли, потому что в данной она отсутствует. Этот пример, между прочим, демонстрирует одну особенность аксиоматического подхода, которая будет неожиданной с точки зрения простого физического смысла: здесь его быть не может.

определения вытекает, что $y = 0$ тогда и только тогда, когда T не заканчивает свою работу над n. Это означает, что если бы мы могли эффективно (алгоритмически) определить истинность равенства $x = y$, мы бы решили вопрос о применимости произвольного алгоритма к произвольному числу, что невозможно. Итак, не существует эффективного способа определения, равны два конструктивных числа или нет.

Такой вывод влечет очень серьезные следствия. Он означает, что любую формулу, которую мы переводим в конструктивизм из обычной математики, надо трактовать именно как алгоритм ее применения, а не как абсолютное равенство. На первый взгляд, это очень странно и даже неудобно, так как мы лишаемся возможности делать прогнозы с абсолютной точностью, ведь нам неизвестна заранее точность приближения r_j. Алгоритм, выдающий эти приближения, на любом шаге способен преподнести нам «сюрприз», который мы в принципе не можем предвидеть!

Но в действительности именно конструктивный подход идеально соответствует квантовой теории. Что мы делаем, чтобы найти волновую функцию? Мы производим последовательные эксперименты, так что на каждом шаге нам известно только приближение настоящего волнового вектора, но не он сам! Если, используя классический анализ, мы неявно предполагаем, что нам может быть известно точное положение частицы в виде ее координаты x, это также предполагает, что нам могут быть известны исходы квантового измерения, содержащиеся в области элементарных исходов Ω, недоступной для пользователя модели (см. главу 6). В квантовой механике, основанной на стандартном анализе, мы вынуждены постулировать недоступность Ω в виде «запрета на скрытые параметры». В конструктивизме же нам не надо этого постулировать, ибо Ω оказывается недоступным в силу теоремы из теории алгоритмов о невозможности распознавания равенства конструктивных чисел, то есть, фактически, невозможности распознавания применимости алгоритмов!

2.4.2. Конструктивные функции конструктивного вещественного переменного

Поскольку в основу конструктивного математического анализа положены алгоритмы, это должно относиться также и к числовым функциям.

Поскольку рациональные числа можно представить в виде пары натуральных со знаком, то они могут служить областью определения функции, задаваемой алгоритмом. Пусть у нас есть функция f, задаваемая алгоритмом, которая отображает произвольные конечные кортежи рациональных чисел в рациональные числа. Для того чтобы эта функция

задавала отображение конструктивных вещественных чисел в конструктивные вещественные числа, необходимо потребовать, чтобы для любой задаваемой алгоритмом сходящейся (в обычных вещественных числах) последовательности $x_1, x_2, \ldots$ рациональных чисел последовательность $f(x_1), f(x_1, x_2), f(x_1, x_2, x_3), \ldots$ также была сходящейся. Пусть пределы этих двух последовательностей есть x и y соответственно. Тогда эти числа являются конструктивными вещественными числами, и мы скажем, что алгоритм f задает конструктивную вещественную функцию, которую мы будем обозначать той же буквой, что и алгоритм: $f(x) = y$. Понятие конструктивной вещественной функции является аналогом функции вещественного аргумента в конструктивном математическом анализе.

Таким образом, функция $y = f(x)$ конструктивной вещественной переменной x является конструктивной, если существует алгоритм T, который по приближению r для x выдает приближение $T(r)$ числа y, причем если $r \to x$, то $T(r) \to y$.

Справедлива теорема (А. А. Марков-младший и Г. С. Цейтин, см. [27, 42]), утверждающая, что **любая конструктивная функция является непрерывной**. Мы не будем приводить здесь ее полного доказательства, ограничившись всего лишь его наброском. Покажем, что функция Хевисайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & \text{если} \quad x \leqslant 0, \\ 1, & \text{если} \quad x > 0, \end{cases}$$

не является конструктивной. Действительно, если бы она была конструктивной, то существовала бы машина Тьюринга, которая выдает последовательные приближения 0 или 1 в зависимости от того, к чему сходится исходная последовательность $x_1, x_2, \ldots$: к нулю или же к какому-либо положительному числу. Возьмем последовательность чисел, совпадающую с $(-1)^n/n$ на шаге n, если некоторая машина Тьюринга M не закончила свою работу на некотором слове a на шаге n, и совпадающую с $(-1)^{n_0}/n_0$, если она закончила работу на шаге n_0. Такая последовательность сходится к некоторому конструктивному вещественному числу $c_{M,a}$. Так как функция f выдает свои значения только по конечному набору $x_1, x_2, \ldots, x_n$, она должна давать приближения своего значения уже на конечном шаге, то в случае, если алгоритм M не закончит работу над a (а так ли это, невозможно определить алгоритмически), функция f будет вынуждена приближать то 0, то 1, и в результате не сойдется к 0, как от нее требуется. Разумеется, это не есть строгое доказательство.

Иными словами, в конструктивном анализе существуют только непрерывные функции. Это можно пояснить еще и так. Конструктивная функ-

ция вещественного аргумента должна давать приближения своих значений, зная только приближенные значения аргумента. Такое требование является очень практичным, так как, в отличие от ситуации в стандартном анализе, значения всех переменных, входящих в формулировку той или иной конкретной задачи, известны нам только с некоторой точностью. При этом мы даже не знаем заранее, с какой именно точностью мы знаем нужные параметры, то есть величина ошибки также может быть нам не известна! И все равно, конструктивная функция должна выдавать нам приближения своих значений (точность которых, таким образом, будет зависеть от точности исходных данных). Этот путь определения вещественных функций является гораздо более физичным, чем их аксиоматическое введение в стандартном анализе.

В конструктивном математическом анализе естественным образом вводится понятие предела последовательности функций. При этом такая последовательность, естественно, должна генерироваться некоторым алгоритмом. Все свойства пределов из стандартного анализа будут сохранены. Дословно аналогично вводится понятие производной, неопределенного и определенного интегралов Римана, при этом все вычислительные свойства, в частности методы решения дифференциальных уравнений, теоремы об устойчивости, и т. д. будут сохранены, с некоторыми вариациями, учитывающими теорему Маркова–Цейтина; эти вариации ни в коей мере не затрагивают аналитических вычислительных методов.

Понятие конструктивного числа и конструктивной функции естественным образом обобщается и на комплексные числа и функции комплексного переменного. Будут сохранены дифференциальные свойства таких функций, включая все теоремы теории функций комплексного переменного, относящиеся к вычетам (теорема Коши), техника вычисления контурных интегралов, то есть останется без изменения все то, что входит в стандартную аналитическую технику, важную для физики.

Проиллюстрируем важность понятия конструктивной функции на простых физических примерах.

Пример 1. Известно, что сингулярность кулоновского поля точечного заряда доставляет много трудностей: например, из-за этого получается бесконечной собственная энергия электрона, если считать его состоящим из (более элементарных) составных частей. Многообразные трудности возникают и при численном моделировании динамики пробного заряда (например, электрона) в поле кулоновских центров. Например, эта динамика становится зависимой от точного начального положения заряда. При рассмотрении отдельного поля, создающегося всеми зарядами, возникает проблема самодействия (см. [19]). Если положение любой заряженной частицы слегка

изменить (или, например, произвести его измерение с некоторой ошибкой, которая всегда имеет место), то собственное кулоновское поле придаст частице громадный импульс, который сведет на нет любые попытки построить удовлетворительную картину динамики. Учтем действие ядерных сил между ядром и электроном.[21] В этом случае потенциал приобретет вид, показанный на рис. 2.1 (относительные размеры не соблюдены). Здесь вверху показан кулоновский потенциал притяжения электрона к точечному протону. Внизу — потенциал взаимодействия с ядром с учетом ядерных сил. На близком расстоянии действует отталкивающий потенциал ядерных сил. Локальный максимум в центре условен — он выражает тот факт, что при очень точном прицеливании электрона при столкновении с протоном образуется нейтрон (см. рисунок). Точное прицеливание соответствует почти классическому рассмотрению электрона. Это происходит, когда он приближается к протону на очень высокой скорости.

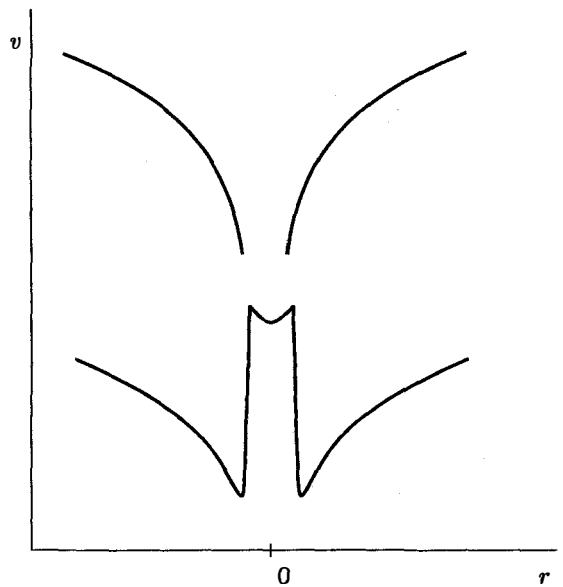


Рис. 2.1. Потенциал электрона в атоме водорода: кулоновский и реальный

На этот пример можно взглянуть и по-другому. Какая сила создает потенциал вблизи ядра? Если это ядерные силы, то электрон должен отска-

[21] Это не есть настоящее решение, оно приведено здесь только для иллюстрации. В главе 5 мы приведем более полное решение, основанное на методе коллективного поведения.

кивать от ядра, как мячик от стенки.[22] Это нисколько не мешает выводам, сделанным на основе уравнения Шредингера. Однако такие удары являются следствием рассмотрения электрона как некоторой гидродинамической среды, которая может создавать давление на ядро. Это может прояснить известный эффект большей стабильности ядра в нейтральном атоме, чем в положительном ионе. Если в тяжелом изотопе, стабильном в нейтральном атоме, произвести ионизацию, удалив часть электронов, то начнется распад ядра [55]. Это говорит о наличии тесной связи электромагнетизма с ядерной физикой, которая не учитывается в стандартной квантовой теории. Далее мы рассмотрим эту ситуацию с точки зрения конструктивизма.

Пример 2. Рассмотрим заряженную частицу в двухъямном потенциале. Ее основное состояние таково, что вероятность найти частицу в каждой из ям примерно одинакова. Теперь будем медленно повышать потенциальный барьер между ямами. Практически это можно сделать, например, используя молекулярный ион водорода, с двумя протонами и одним электроном. Повышение барьера будет равносильно увеличению расстояния между протонами, которое можно организовать, разгоняя ион в электрическом поле и организуя его соударения с химически нейтральными молекулами. Можно поступить и еще проще, рассматривая две квантовые точки и один электрон в них. Тогда повышение барьера делается увеличением напряжения на затворах.

В конце концов мы получим две разные ямы, и пробная частица (электрон) окажется в одной из них. Такой процесс в стандартной квантовой теории называется коллапсом волновой функции, и он происходит мгновенно. В конструктивизме такое объяснение не проходит, так как оно не описывается конструктивной функцией, что означает необходимость выхода за пределы стандартной квантовой теории.

Эти два примера иллюстрируют важность применения конструктивных функций, так как реальная картина не должна содержать сингулярностей. Но эти примеры отличаются друг от друга. Первый означает, что в одном алгоритме возможно фактическое объединение различных физических законов. Во втором примере требование конструктивности сразу влечет выход за пределы стандартной квантовой механики.

Важнейшее преимущество конструктивного анализа перед классическим состоит в том, что конструктивный анализ явно требует строить модели процессов, масштабируемые по зерну пространственного разрешения. Действительно, рассмотрим процесс, описываемый функцией вещественной переменной $f(x)$. Если бы эта функция была обыкновенной вещественной

[22] Аналогия, конечно, не учитывает размеры: если электрон представляется мячом, то ядро будет похоже на маленькую гирю, она гораздо меньше мяча, и тяжелее его.

ной функцией, то точность определения x никоим образом не означала бы точность определения $f(x)$ — как это и происходит в разрывных функциях. Даже если бы $f(x)$ была непрерывной, но не конструктивной, мы бы не могли алгоритмическим образом определить нужную точность задания ее значения $f(x)$ при заданном приближении x. Однако такая возможность давать приближения $f(x)$ по имеющемуся приближению x очень важна. Представим себе, что значения x на самом деле зернисты, то есть имеют вид $n\epsilon$ при целых n и очень малом фиксированном ϵ, которое столь мало, что не доступно непосредственному наблюдению. Конструктивный анализ обязывает нас явно указать механизм обрыва точности при приближении $f(x)$ по любому сколь угодно точному приближению x. Это означает, что, каким бы малым ни было значение зерна ϵ, наш алгоритм, задающий функцию f, должен работать с этим зерном. Мы будем просто обрывать процесс последовательных приближений $f(x)$ тогда, когда приближение x достигло точности зерна ϵ. Преимущество здесь заключается в том, что мы избавляемся от необходимости рассматривать паталогические функции f, существующие в обычном анализе. Это делает совершенно строгими, например, расчеты по методу интегралов по траекториям Фейнмана, где при малых расстояниях пути заменяются прямыми. В противном случае, при использовании обычного анализа, приходится прибегать к построениям, лишенным математической строгости,[23] что является не вполне корректным, а значит, и рискованным приемом (если уж использовать аппарат, надо выполнять связанные с ним формальности).

2.5. Конструктивная алгебра для квантовой механики

Этот параграф посвящен алгебраическому аппарату квантовой теории. Сначала мы опишем его для стандартной квантовой механики, затем напомним базовые сведения из теории алгебраических систем и, наконец, определим понятие конструктивизации алгебраических объектов, используемых в квантовой теории. Мы будем использовать для таких объектов общий термин «алгебраические системы», принятый в математике, хотя реально используются, в основном, гильбертовы и евклидовы пространства, а также группы операторов в них.

2.5.1. Алгебраический аппарат квантовой теории

Алгебраический аппарат квантовой теории можно условно разделить на следующие большие категории.

[23] В книге [19] на это прямо указывается.

- Алгебраические системы конфигурационного пространства классических состояний физического ансамбля.

- Алгебраические системы пространства квантовых состояний рассматриваемого ансамбля.

В квантовой теории используется самый богатый алгебраический аппарат; например, в теории тяготения применяют только первый тип алгебраических систем. Это связано с базисным принципом квантовой теории — суперпозицией квантовых состояний. Этот принцип фактически делает основной матричную технику описания эволюций, то есть вводится явное пространство состояний рассматриваемой системы и связанные с ним алгебраические системы.

Рассмотрим первый тип алгебраических систем. Пусть K обозначает конфигурационное пространство рассматриваемой квантовой системы. Если она состоит из n частиц без спина, это будет R^{3n}, если у частиц есть направление спина вдоль или против некоторой выделенной оси, это будет R^{4n}, если есть еще время, общее для всех частиц, это будет R^{4n+1}, если у каждой частицы свое время, это будет R^{5n}, и т. д. Такое пространство всегда предполагается локальным, то есть данные координаты могут применяться только в малой окрестности некоторой точки O, которая считается началом отсчета. Элементы пространства K обозначаются через $|j\rangle$. Глобально конфигурационное пространство будет представлять собой многообразие M соответствующей размерности: $3n$, $4n$, ... Мы не будем здесь обсуждать структуру многообразия M; для одной частицы оно описывается матрицей метрического тензора $g_{i,j}$, удовлетворяющего уравнению ОТО (см. книгу [54]). Вопрос структуры M для многих частиц открыт. Это вопрос о согласовании квантовой механики и ОТО, и его нерешенность никак не будет сказываться на наших задачах. Преобразование перехода к другим координатам для каждой из частиц всегда действует только в малой окрестности одной точки и должно сохранять значение дифференциальной формы

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 - c^2 dt^2, \tag{2.4}$$

где x, y, z, t — координаты этой частицы (первые три — пространственные и четвертая — временная), c — скорость света. Такие преобразования образуют группу, называемую группой Пуанкаре. Можно рассматривать производные алгебраические конструкции над этой группой, например, ее представления, характеры представлений, и т. п.

Второй тип алгебраических систем связан с пространством квантовых состояний $\mathcal{H}$ рассматриваемого физического ансамбля. Пространство $\mathcal{H}$ со-

стоит из линейных комбинаций вида

$$|\Psi\rangle = \sum_{j \in K} \lambda_j |j\rangle, \tag{2.5}$$

в которой различные состояния $|j\rangle$ считаются ортогональными друг к другу и имеющими единичную норму, а λ_j есть комплексные числа. При этом мы предполагаем, что число всех элементов K конечно. Практически это означает, что мы договариваемся о том, что рассматриваемая нами система может занимать не любое классическое положение из континуального многообразия, а только из какого-то конечного подмножества этого многообразия. Это достигается выбором зерна пространственного и временного разрешения δx и dt, а также ограничением рассматриваемой области K.

Главными операторами в этом пространстве являются детерминистические операторы эволюции рассматриваемой системы вида

$$S: \ \mathcal{H} \to \mathcal{H} \tag{2.6}$$

и случайные операторы измерений.

Рассмотрим сначала детерминистический оператор (2.6). Этот оператор является элементарным шагом эволюции системы в реальном физическом времени. Время t, фигурирующее при этом в качестве одной из координат конфигурационного пространства K нашей системы (или времена, если для разных частиц они различны), является административным временем квантовой системы.

Запись эволюции в виде оператора (2.6) содержит серьезное условие: мы считаем, что можно одновременно рассматривать эволюцию нескольких состояний рассматриваемого ансамбля, то есть потенциально все пространство его квантовых состояний. Как это согласуется с экспериментом, в котором единовременно можно рассматривать только одно-единственное состояние реального ансамбля и эволюцию во времени именно этого, а не иного состояния? Согласование представляет собой принцип суперпозиции, который утверждает, что оператор S всегда является линейным. Это надо понимать так: мы всегда имеем возможность повторить эволюцию для других выбранных в пространстве $\mathcal{H}$ квантовых состояний нашего ансамбля и убедиться в линейности непосредственно. Для этого надо иметь возможность генерировать векторы из пространства $\mathcal{H}$ произвольно, что предполагает, в частности, возможность генерировать одно и то же состояние сколь угодно большое число раз. Далее, из уравнения Шредингера вытекает, что, по крайней мере, в обычной квантовой механике, оператор S должен иметь

вид $\exp(iH)$ для эрмитова оператора H, и потому S должен быть унитарным оператором в $\mathcal{H}$. Требование унитарности всех операторов эволюции сохраняется и для квантовой электродинамики. Таким образом, основным алгебраическим объектом, связанным с пространством квантовых состояний, является группа унитарных операторов $U(\dim(\mathcal{H}))$ размерности, равной размерности $\mathcal{H}$, которая представляет собой экспоненту от размерности конфигурационного пространства K.

Можно рассматривать алгебры Ли для таких групп, определив умножение как взятие коммутатора матриц, а сложение — обычным образом, тензорные произведения таких групп, которое будет соответствовать эволюции независимых ансамблей, ограничения на подпространства, и т. д.

Недетерминистический случайный оператор измерения является случайной величиной, распределение которой зависит от данного состояния $|\Psi\rangle$. Если $\mathcal{H} = \bigoplus_{k=1}^{l} H_k$ есть разложение $\mathcal{H}$ на ортогональную сумму подпространств, то измерение относительно данного разложения является случайной величиной, принимающей значение, равное оператору проекции на подпространство H_k с вероятностью, равной квадрату длины проекции $|\Psi\rangle$ на это подпространство. Ниже мы покажем, что при довольно естественном способе конструктивизации (зерно амплитуды) случайный оператор измерения может быть включен в схему, единую с оператором временной эволюции. Этот способ предполагает условие зернистости конфигурационного и гильбертова пространств. Зернистость означает конечность не только всех возможных положений системы, но и всех значений амплитуд. Поэтому мы будем рассматривать только операторы типа (2.6). Фактически, если принять способ конструктивизации, основанный на зерне амплитуды, измерение сводится к расширению конфигурационного пространства.

Группа $U(\dim(\mathcal{H}))$ является алгебраической системой в сигнатуре, состоящей из одного двуместного функционального символа $\cdot$ группового умножения, которое соответствует последовательности операторов эволюции, отражающей ход реального времени. Классические алгебраические системы, основанные на вещественных числах, например, алгебры над полем R или C, подразумевают использование стандартного математического анализа. По существу, алгебраические системы дают удобные алгоритмы для решения уравнений квантовой механики, прежде всего — уравнения Шредингера. В частности, матричное произведение точно выражает явление, называемое квантовой интерференцией. Рассмотрим матричное произведение двух матриц $U = (u_{ij})$ и $V = (v_{jk})$: $UV = W = (w_{ik})$. Если U и V — операторы последовательных шагов временной эволюции, то это матричное произведение есть оператор результирующей эволюции. Что выражает

правило матричного произведения $w_{ik} = \sum_j u_{ij} v_{jk}$? Оно выражает закон интерференции, согласно которому для получения амплитуды перехода из состояния i в состояние k надо сложить вклады всех путей из i в k через все промежуточные состояния j, так что для любого пути амплитуды его последовательных частей умножаются. Этот закон интерференции лежит в основе квантовой физики. Мы видим, что алгебраический язык матричной алгебры является его наиболее кратким и точным выражением. Это и обусловливает ту важнейшую роль, которую алгебра играет в квантовой теории.

2.5.2. Конструктивные алгебраические системы

Конструктивный анализ содержит условие предельных переходов, задаваемых алгоритмом: $r \to x$, $T(r) \to y = f(x)$. Хоть это формально и можно свести к конструктивной алгебраической системе, это ничего не даст, так как в алгебраических системах главным является не сходимость, а алгебраические свойства. Тем не менее, если мы захотим конструктивизировать конечномерную алгебру над полем вещественных или комплексных чисел, мы можем просто перенести все определения, вставляя вместо вещественных чисел конструктивные вещественные числа. Поскольку все используемые в алгебраических системах функции выражаются формулами (например, функция сложения), все они будут автоматически конструктивными, и мы не выйдем за пределы конструктивного математического анализа.

Единственное своеобразие алгебры в том, что в ней встречаются не только бесконечности, обусловленные вещественными числами, но и «собственные» бесконечности, входящие в алгебраические системы. Эти бесконечности возникают при рассмотрении бесконечномерных алгебраических систем (например, линейных пространств или групп) или при потенциально бесконечном усложнении внутренней структуры даже и конечномерных алгебраических систем (например, групп со сложной системой соотношений). Нам, собственно, осталось указать, как конструктивизировать эти чисто алгебраические бесконечности.

Назовем системой определяющих соотношений для алгебраической системы такую систему $\mathcal{A}$ равенств вида $F_1(x_1, x_2, \ldots, x_h) = F_2(y_1, y_2, \ldots, y_d)$, зависящих от элементов этой системы, из которых можно вывести логическим путем все верные равенства между элементами в данной алгебраический системе. Если использовать аналогию с конструктивным анализом, надо было бы потребовать существование алгоритмически разрешимой системы определяющих соотношений для любой ис-

пользуемой нами алгебраический системы. Это означает, что все верные равенства можно перечислить некоторым алгоритмом.[24]

Есть более сильный вариант конструктивности для алгебры. Он получится, если мы потребуем того, чтобы множество верных равенств было бы алгоритмически разрешимым. Если в первом варианте мы фактически требовали перечислимости множества верных равенств, то во втором варианте мы требуем разрешимости этого множества, что является более сильным требованием.

Различия между этими двумя версиями конструктивности алгебраических систем существенны в случае алгебраически сложных объектов (например, специально определенных групп). В квантовой механике, где используются, в основном, группы типа $U(n), SU(n)$, соответствующие алгебры Ли и их матричные представления, такие экзотические объекты встречаются очень редко и только в специально построенных задачах. Поэтому я не буду углубляться далее в анализ конструктивной алгебры, которая превратилась в довольно обширную область. Все, что нам нужно знать для конструктивизации квантовой физики: весь используемый алгебраический аппарат, вслед за математическим анализом, переводится на конструктивные рельсы.

2.5.3. Резюме математического конструктивизма

Конструктивная математика полностью сохраняет вычислительную часть классической математики, то есть все приемы, связанные с дифференцированием, интегрированием, решением дифференциальных уравнений, алгебраическими методами, а также вопросами устойчивости, оптимизации и т. п. Отличие конструктивной математики от обычной в том, что в конструктивизме ко всем процедурам предъявляется стандартное требование эффективности, что является более жестким требованием, по сравнению с логической непротиворечивостью в традиционной математике. Требование эффективности не означает всеобщую алгоритмизируемость. Вычисления с оракулом задают тот формат в конструктивизме, который позволяет работать с процессами неалгоритмической природы, например, явно указывает на форму взаимодействия человека с создаваемыми в рамках конструктивного подхода алгоритмами. Все это серьезно отличает конструктивизм от традиционной математики.

[24] Конструктивная алгебра возникла в 60-х годах XX века в работах А. И. Мальцева, А. А. Маркова-младшего, П. С. Новикова, С. И. Адяна и др. Ее главный вопрос: является ли некоторое свойство алгебраических систем алгоритмически разрешимым. В 80-х годах стал возникать также вопрос о сложности.

Конструктивная математика великолепно приспособлена для выполнения роли формального аппарата физики, включая самую фундаментальную ее часть — квантовую теорию. Она способна навести порядок в сфере, лежащей вне пределов квантовой теории и часто порождающей бесплодные и изнуряющие дискуссии физиков, вынужденных заменять философией дефекты математического аппарата. Можно с полным основанием утверждать, что конструктивизм представляет собой более зрелую форму математики по сравнению с традиционной классической математикой. Его регулярное применение в теоретической физике представляется мне самой желательной перспективой.

Глава 3

Модели, основанные на классической физике

Классическая физика является основой для всей физики в целом, поскольку на ней основано все человеческое восприятие и образное представление о мире. Мы должны исходить из классической физики также и по причине необходимости сохранения преемственности в науке. Эта преемственность не является просто данью традиции. Она имеет вполне точную форму, например, по отношению к квантовой механике. Классическая физика является неотъемлемой составной частью квантовой механики, без которой последняя просто не может существовать. Фундаментальное понятие измерения физических величин, лежащее в основе квантовой теории, предполагает логически наличие обыкновенной, классической физики. Излагая алгоритмический взгляд на классическую физику, мы должны при этом ясно понимать, что классичность в физике не совпадает с понятием классического алгоритма. В частности, в терминах классических алгоритмов можно излагать и классическую, и квантовую механику.

3.1. Частицы и элементарные взаимодействия

Главным понятием всей физики является понятие частицы, поскольку именно оно позволяет применять математический аппарат к реальности. Классическая частица представляет собой абстрактный объект, который имеет такие характеристики, как координаты в абстрактном (конфигурационном) пространстве-времени, массу, заряд, спин, динамические характеристики типа импульса и энергии, а также и возможные указания на то, из чего эта частица состоит, и на то, как ее составные части меняются во времени. Мы видим, что определение частицы получается довольно расплывчатым, и при желании можно подогнать под это определение любой объект. Это связано с тем, что определение того, что именно считать частицей, является прерогативой пользователя модели. Мы будем считать,

что главными характеристиками классической частицы являются ее координаты в пространстве-времени, закон их эволюции (скорость) и указание на тип этой частицы, из которого следуют все остальные атрибуты данной частицы.

Важнейшим понятием является понятие о тождественности частиц, выражающееся в том, что тождественными мы называем частицы, имеющие один тип. Мы уделим этому вопросу некоторое внимание в главе 6, а пока отметим следующее. Реальное число частиц в природе столь велико, что нет никакой возможности строить модели, в которых имелась бы возможность адресации к каждой частице в отдельности (например, если физики и разделяют электромагнитное поле на фотоны, то всегда говорят о том, что число фотонов бесконечно велико). Это выражается в том, что для физических величин используются вещественные числа даже в том случае, когда в принципе возможно говорить о составных частях этих величин (как в случае с фотонами).

Полевое представление системы частиц — это ее формальное кодирование с помощью чисел, выражающих полное число частиц или сумму некоторых их атрибутов.

Например, мы можем вместо системы частиц $S = \{s_1, s_2, \ldots, s_k\}$ рассмотреть их плотность в разных точках, которая находится по правилу

$$\rho(\bar{r}) = \lim_{dx \to \infty} \frac{N(\bar{r}, dx)}{dx^3},$$

где через N обозначается полное число частиц в кубе с ребром dx с центром в точке $\bar{r}$. Тогда вместо перечисления множества S можно пользоваться функцией плотности $\rho(\bar{r})$. Разумеется, это будет иметь смысл только тогда, когда число частиц достаточно велико. К тому же в любом случае нам придется ограничить математически точное понятие предела в этом определении, так как число частиц никогда и нигде не бывает бесконечным. То есть нам придется применять идеологию конструктивного математического анализа (см. раздел «Конструктивный математический анализ»), применение же стандартного анализа ограничено только возможностью рассмотреть приближенное решение. Использование плотности, то есть общего числа частиц, вместо их перечисления обещает экспоненциальную выгоду при записи, так как вместо числа k нам придется хранить нечто вроде $\log\ k$ или некоторую комбинацию таких логарифмов в некоторой степени. В любом случае, выигрыш от полевого представления будет почти экспоненциальным.

Но этот экспоненциальный выигрыш сохранится только тогда, когда мы зафиксировали размерность конфигурационного пространства. То есть

мы должны считать, что динамические сценарии развертываются в R^3 и только в нем! Если мы, на минуту, предположим, что частицы, образующие поле, способны на некие индивидуальные взаимодействия, то есть взаимодействие не со всеми остальными частицами сразу, а только с некоторыми избранными, например, способны образовывать пары с одним из ближайших соседей, — ситуация радикально изменится. В этом случае динамический сценарий будет зависеть вовсе не от плотности $\rho(\bar{r})$, а от более тонких деталей взаимного расположения частиц. В предельном случае нам придется фиксировать эти положения с абсолютной точностью (например, указывать на поверхности кристалла точный номер атома) для каждой частицы. Это означает, что если, например, всего положений N для каждой частицы, а число частиц m, то всего будет N^m различных конфигураций. Допустим, мы применяем к этой ситуации тот же прием перехода к полевому представлению. Тогда, в лучшем случае, нам надо будет иметь память порядка $\log\ N^m = O(m)$, если считать, что $N = \text{const}$, а растет только число частиц. То есть нам придется фактически перейти к рассмотрению именно индивидуальных частиц, а не поля. Все эти замечания относились к классическому описанию частиц. При квантовомеханическом описании эффект перехода от поля к отдельным частицам будет еще больше, и это будет рассматриваться ниже. Пока мы лишь отметим, что с увеличением сложности взаимодействия частиц друг с другом размерность задачи будет резко возрастать.

Класс явлений, к которым применимо полевое представление, можно условно назвать сплошными средами. Условность этого названия в том, что к этому классу систем мы относим не только среды, изучаемые в гидро- и аэродинамике, но и твердые тела, электронный газ, электромагнитное поле и вообще любые системы, в которых можно пренебречь индивидуальными особенностями взаимодействия отдельных частиц. Численный критерий здесь — возможность получать правдивые модели динамических сценариев с помощью полевого представления системы.[1] В этом разделе мы кратко коснемся систем, допускающих полевое рассмотрение. Его преимущество заключается в возможности применения аналитических методов расчета, связанных с решениями дифференциальных уравнений. Мы не будем выводить эти уравнения (их вывод можно найти, например, в книге [53]). Рас-

[1] Здесь нет и не может быть никаких критериев в зависимости от числа частиц. Индивидуальные особенности взаимодействий могут иметь радикальные последствия для систем со сколь угодно большим числом частиц, и это выражается в ограниченной применимости к таким системам законов типа гидродинамики. Например, динамические сценарии эволюции звезд являются в большей мере результатом обобщения астрономических наблюдений, чем результатом прямого применения полевых представлений, и зависимость таких сценариев от индивидуальных взаимодействий является открытым вопросом.

смотрим только избранные вопросы, имеющие отношение к дальнейшему изложению.

Вся физика построена на том, что типов частиц немного, а самих частиц — очень много. Координаты частицы как раз и являются атрибутами, выражающими положение данной частицы среди других частиц.[2] Соответственно, все атрибуты частицы можно разделить на абсолютные (тип этой частицы, а также все его производные — масса, заряд, возможные значение спина, и т. д.) и относительные (координаты, импульс, а также конкретное значение спина). Это будет также справедливо и для частиц, не являющихся точечными, но тогда их конфигурационное пространство имеет большую размерность, чем 3.

Разделение атрибутов частиц на абсолютные и относительные условно, так как мы можем, при желании, обьявить какие-либо из относительных атрибутов просто координатами в расширенном должным образом конфигурационном пространстве. В частности, можно ввести в это пространство так называемую спиновую координату, и она будет указывать направление спина частицы в некотором специальном (спиновом) подпространстве расширенного конфигурационного пространства. Так же можно поступить и с некоторыми абсолютными атрибутами, например, с некоторыми типами частиц.[3]

При квантовомеханическом рассмотрении частиц возможно также и обратное: мы можем различать частицы в зависимости от их состояний и даже временно включать это различие в тип, говоря, например, об электроне в основном состоянии и т. д.

Вообще число типов частиц будет жестко ограничено, например, мы можем рассматривать ядра атомов и электроны, или молекулы. Но иногда может быть целесообразно расширить эти стандартные типы, добавив к ним еще некоторые новые: например, можно рассмотреть в качестве частиц кванты колебательного движения кристалла (фононы) или фотоны, можно рассматривать такие экзотические частицы, как куперовские пары, а также большие системы из многих атомов, которые почему-либо ведут себя как одна частица.

Если частица P_0 состоит из набора более мелких частиц $P_0^1, P_0^2, \ldots, P_0^k$, то заряд и масса этой частицы равна сумме соответствующих величин для каждой из составляющих ее частей.

Взаимодействие между частицами описывается с помощью полей.

[2] И, в основном, среди тех, которые в нашу модель не входят, а составляют так называемую систему отсчета.

[3] Введение изотопического спина позволяет говорить о протоне и нейтроне как о частицах одного типа, но имеющих разное значение изоспина.

В стандартном математическом формализме поле является фундаментальным объектом и задается функцией вида

$$S \rightarrow L, \tag{3.1}$$

где S есть конфигурационное пространство рассматриваемой системы частиц, L есть некоторое векторное пространство. При этом L может быть тензорным произведением $L = L_1 \bigotimes L_2 \bigotimes \ldots \bigotimes L_h$ различных векторных пространств (определение см. в следующей главе), базисные элементы которых имеют свой смысл для каждого L_j, например, некоторые пространства могут состоять из первичных элементов, скажем, обычных векторов или каких-либо вещественных или комплексных функций, и тогда они называются контравариантными, а другие пространства из L_j могут быть пространствами линейных функционалов над первичными пространствами, и тогда они называются ковариантными. Такое линейное пространство L называют еще тензорным пространством, а поле тогда будет тензорным. Рассмотрение тензорных полей удобно, например, для описания гравитации.

Самым важным для нас моментом в этом определении будет то, что под полем всегда подразумевают некое правило, по которому каждой точке конфигурационного пространства ставится в соответствие вектор из фиксированного векторного пространства. Иными словами, каждому положению (частицы) в пространстве соответствует некоторый объект, причем разные такие объекты можно складывать и умножать на числа с выполнением стандартных законов ассоциативности и дистрибутивности умножения по отношению к сложению. То есть понятие поля хорошо приспособлено к тому, чтобы рассматривать не просто отдельную траекторию частицы в последовательные моменты времени t, но и для рассмотрения разных возможных траекторий одной или разных частиц, а также для (одновременного с точки зрения пользователя, но не администратора) рассмотрения состояний одной и той же частицы в разные моменты времени. Таким образом, поле уже предоставляет необходимые средства как для построения квантовой механики, когда мы имеем дело с разными траекториями одной и той же частицы, так и релятивизма, где разные моменты времени рассматриваются единообразно (см. раздел 4.3).

3.2. Дифференциальные уравнения

Математический анализ возник из необходимости рассматривать очень малые (в пределе — бесконечно малые) отрезки пространства и времени

и проводить вычисления больших величин, исходя из процессов, происходящих в этих малых областях. Техника точного решения дифференциальных уравнений является единственным эффективным подходом построения динамических моделей без применения компьютеров, и мы проиллюстрируем наши соглашения о моделях именно на этом традиционном материале.

3.2.1. Модель теплопроводности и колебаний

Мы будем заниматься процессами в трехмерном пространстве, и потому сразу будем использовать дифференциальные уравнения в частных производных.

Динамические модели, в основном, описываются уравнениями второго порядка, которые надлежащим выбором переменных можно привести к параболическому и гиперболическому видам (эллиптические уравнения используются, в основном, для описания стационарных состояний). Мы именно этими типами уравнений, а именно — вкратце обсудим стандартные численные методы их решения. Мы для примера рассмотрим уравнение теплопроводности, относящееся к параболическому типу (эта схема может быть перенесена и на уравнения гиперболического типа).

У нас имеется задача Коши для прямоугольника $x_0 \leqslant x \leqslant x_m$, $t_0 \leqslant t \leqslant t_n$, вида

$$\begin{aligned} \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \frac{\partial u}{\partial t}, \\ u(x_0, t) &= u_a, \\ u(x_n, t) &= u_b, \\ u(x, 0) &= u_{x,0}. \end{aligned} \tag{3.2}$$

Разобьем нашу прямоугольную область на прямоугольники точками x_j, y_s, образующими равномерную решетку с шагами Δx, Δy по обеим координатам, и будем обозначать через $u_{j,k} = u(x_k, t_j)$, $j = 1, 2, \ldots, m$, $k = 1, 2, \ldots, n$ значения искомой функции в узлах этой решетки. Под слоем мы будем понимать совокупность узлов решетки, имеющих одинаковое значение времени. Идейно самым простым будет явный метод решения задачи (3.2). Он состоит в том, что мы находим значения $u_{j,k}$ слой за слоем, решая очевидные уравнения вида

$$\frac{u_{j,k+1} - 2u_{j,k} + u_{j,k-1}}{(\Delta x)^2} = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{u_{j+1,k} - u_{j,k}}{\Delta t} \right) \tag{3.3}$$

относительно $u_{j,k+1}$ последовательно при $k = 1, 2, \ldots, m$ для всех $j = 1, 2, \ldots, n$. Этот метод является простым обобщением известного метода

Эйлера решения обыкновенного дифференциального уравнения. В терминах модели этот прямой метод означает, что мы рассматриваем только один сценарий эволюции системы, описываемой функцией u, а именно тот, что получается применением приближения значения функции с помощью определения первой производной. Хорошо известно условие устойчивости прямого метода:

$$\Delta t \leqslant \frac{(\Delta x)^2}{2\alpha}. \tag{3.4}$$

Из этого условия вытекает, что для построения правдоподобной картины эволюции нам придется потратить порядка $O(\delta^{-3})$ шагов для моделирования всего процесса при условии фиксации времени $t_m - t_0$, если δ есть выбранное зерно пространственного разрешения.

Более экономичным методом является так называемый обратный метод решения задачи Коши (3.2). Он состоит в том, что мы решаем не уравнения (3.3), а составляем систему линейных уравнений относительно $u_{j+1,k}$ на основе равенств

$$\frac{u_{j+1,k+1} - 2u_{j+1,k} + u_{j+1,k-1}}{(\Delta x)^2} = \frac{1}{\alpha}\left(\frac{u_{j+1,k} - u_{j,k}}{\Delta t}\right), \tag{3.5}$$

для $j = 1, 2, \ldots, m,\ k = 1, 2, \ldots, n$. Матричная форма такой системы имеет вид

$$\begin{pmatrix} \beta & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1\beta & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 1 & \beta & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & - & - & - & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & - & - & - & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \beta & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{j+1,1} & & \\ u_{j+1,2} & & \\ u_{j+1,3} & & \\ - & & \\ - & & \\ & u_{j+1,n-1} & \\ & u_{j+1,n} & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ll\Omega u_{j,1} - u_a \\ \Omega u_{j,2} \\ \Omega u_{j,3} \\ - \\ - \\ \Omega u_{j,n-1} \\ \Omega u_{j,n} - u_b \end{pmatrix}, \tag{3.6}$$

где

$$\beta = -2 - \frac{(\Delta x)^2}{\alpha \Delta t},\ \Omega = \beta + 2.$$

Решая системы (3.6) последовательно для $j = 0, 1, \ldots, n$, мы получим значения $u_{j,k}$, которые и дают решение задачи Коши (3.2). Этот метод называется прогонкой, и он выглядит совершенно аналогично для гиперболических уравнений, с той лишь разницей, что разностная схема для первой производной по времени будет тогда заменена на разностную схему для второй производной.

Метод прогонки имеет такую же вычислительную сложность, что и прямой метод для одного шага, поскольку решение системы (3.6) требует порядка $O(m)$ операций ввиду почти диагональной формы матрицы системы. Однако прогонка обладает устойчивостью при выборе шагов Δx, Δt, обеспечивающих точность аппроксимации производных разностными схемами, то есть здесь для устойчивости не требуется выполнения условия (3.4). Это дает возможность выбирать шаг по времени достаточно большим, и результирующая сложность определения конечного состояния системы в конечный момент времени сильно упростится, став просто линейной по времени $t_n - t_0$, что дает возможность говорить о возможности моделирования процесса в режиме реального времени.

Теперь посмотрим на прогонку с точки зрения моделирования процесса, описываемого задачей Коши (3.2). Решение последовательных систем уравнений (3.6) является способом построения динамического сценария для нашей задачи. Вполне естественно, что этот сценарий создается последовательно, в соответствии с ходом реального физического времени. Однако прогонка принципиально отличается от прямого метода тем, что она использует неявную схему для уравнения (3.2). Это значит, что на каждом отдельно взятом шаге мы существенно используем информацию о структуре результата этого шага, прежде чем совершить сам шаг. Иными словами, на каждом конкретном шаге мы забегаем вперед, чтобы посмотреть, что должно получиться в результате, в то время как в случае прямого метода мы просто выписываем результат вычисления следующего состояния исходя из приближения производных разностной схемой. Таким образом, можно констатировать, что такое заглядывание вперед на один шаг является очень эффективным приемом построения динамических сценариев для классических систем, которые описываются дифференциальными уравнениями в частных производных, а это как раз и есть системы, в которых действуют законы классической физики.

3.2.2. Об уравнении Навье–Стокса

Движение вязкой ньютоновской несжимаемой жидкости описывается уравнением Навье–Стокса

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} = -(\bar{v} \cdot \nabla)\bar{v} + \mu \Delta \bar{v} - \frac{1}{\rho}\nabla p + \bar{f}, \tag{3.7}$$

где ∇ обозначает градиент, $\bar{v}$, p, ρ — скорость, давление и плотность жидкости, $\bar{f}$ — силовое поле, а μ — коэффициент внутреннего трения, отнесенный к плотности (кинематическая вязкость), которая в ньютоновской жидкости

предполагается не зависящей от скорости частиц. К уравнению (3.7) добавляется уравнение непрерывности, в случае несжимаемости имеющее простой вид $\nabla \cdot \bar{v} = 0$, а также граничные и начальные условия, для получения соответствующей задачи Коши. Уравнение (3.7) включает в себя, в частности, уже рассмотренные нами типы процессов. В более сложном случае, когда предметом моделирования является сжимаемая среда, это уравнение приобретает более сложный вид (см. [59, 68]). Формально уравнение чисто классическое, а квантовый характер носит только коэффициент вязкости μ, так как он определяется квантовыми процессами соударения атомов жидкости.[4]

Обратим внимание на интересную особенность решений уравнения Навье–Стокса. В области неустойчивости в ряде случаев мы наблюдаем неограниченный рост скорости при рассмотрении все более малых объемов среды. Это свойство характерно для «гидродинамического» рассмотрения квантовой частицы, которое мы дадим позднее. Появление больших скоростей при уменьшении рассматриваемых объемов имеет в квантовом случае фундаментальную природу, связанную с соотношением неопределенности «координата–импульс». Но динамика среды со скоростями, давлением и вязкостью имеет и еще более глубокую связь с квантовой механикой многих частиц, что мы рассмотрим далее. Пока заметим только, что уравнение Навье–Стокса не может претендовать на полную адекватность описания данного явления, поскольку оно полностью игнорирует фундаментальный механизм квантовой запутанности, который не сводится только к определению μ, а охватывает сразу несколько атомов. Именно это определяет наблюдаемую сложность явления, например, переход к турбулентности.

3.3. О масштабируемости классических моделей

Под масштабированием модели мы будем понимать способность этой модели к распространению на новые области применения по сравнению с исходной задачей, для которой она создавалась. При этом распространении не должно происходить изменение алгоритма построения сценариев модели, то есть масштабирование означает возможность применения данного алгоритма для работы с большим спектром разных систем. Прежде всего под новой областью мы понимаем новую пространственную область, и тогда говорят о пространственном масштабировании модели.

[4] Уравнение столкновений Больцмана, на основе которого получается уравнение (3.7), формально получается на основе классических представлений, но стоящая за ним реальная динамика носит безусловно квантовый характер.

Важным случаем пространственного масштабирования является увеличение или уменьшение зерна пространственного разрешения, то есть переход к более протяженным в пространстве системам или рассмотрение данной системы при большей детализации процессов. Фактически под пространственным масштабированием мы чаще всего будем иметь в виду именно это. Еще можно говорить о масштабировании модели по взаимодействиям. Это означает, что данный алгоритм моделирования годится для каких-либо иных взаимодействий, кроме тех, для которых он первоначально предназначался.[5]

Здесь мы, конечно, имеем в виду идеальный случай. В действительности при распространении модели на новые области или включении новых взаимодействий всегда требуется некоторое видоизменение алгоритма. Важно, чтобы это изменение было локальным и не приводило к пересмотру эвристики, то есть идеи алгоритма. Точных критериев локальности изменения, разумеется, дать нельзя. Но это и не должно составлять особую проблему. При переносе любых методов с одной задачи на другую всегда возникает проблема адаптации метода к новой задаче; это выражается, хотя бы, в назначении переменным в формуле новых величин, что и является примером локального изменения. Мы будем считать локальным любое изменение, которое можно сделать быстро, что означает неизменность основных логических конструкций модели.

Важно то, что масштабирование не является свойством одной модели, оно зависит от задач, к которым эта модель применяется (мы имеем в виду, какие взаимодействия нужно обязательно учесть, а какими можно пренебречь). Например, в задачах по химическим реакциям никто не учитывает гравитационного взаимодействия реагентов. Другой пример могут дать задачи небесной механики. Классические модели гравитации, применяемые к таким задачам, допускают высокую степень масштабирования при увеличении протяженности рассматриваемой системы до 10^{20} см, так как движение галактик они предсказывают неплохо; происходящее на 10^{30} см, уже описывается такими моделями менее точно, так как здесь существенную роль начинает играть то, что можно назвать фазовыми переходами: процессы образования звезд, планетных систем и галактик. Это процессы иного рода, идущие на атомном и ядерном уровне, и их невозможно описать теорией гравитации в любой ее форме. Здесь надо привлекать квантовую физику. Просто масштабирование классической теории гравитации (впрочем, равным образом и релятивистской, которая используется при полетах на дальние расстояния в космосе для определения необходимых поправок

[5] Например, модель ядерных взаимодействий Янга – Милса является результатом адаптации формализма электродинамики к ядерным взаимодействиям.

к классической модели) на масштабы меньше 10^{-10} см невозможно, так как здесь начинают играть роль квантовые процессы, а единой теории поля у нас до сих пор нет.[6]

Однако было бы ошибкой считать, что классическая физика позволяет получать удовлетворительные модели всех явлений, связанных с гравитацией в пространственных масштабах небесной механики. С ее помощью можно хорошо описывать орбиты спутников и траектории полета космических кораблей. Но она не может решать вопросы об устойчивости системы нескольких тел. Например, с ее помощью невозможно ответить на вопрос об устойчивости солнечной системы на протяжении даже тысячи лет. Этот вопрос формально упирается в вычислительные сложности, возникающие при его решении известными численными методами. Однако у нас нет никаких способов определить, что принципиально определяет эту устойчивость, поэтому самое благоразумное, что здесь можно сделать — это признать, что существующих методов для решения этого вопроса просто недостаточно.

Масштабирование модели является, таким образом, принципиальным вопросом, так как речь идет о согласовании языков разных наук или разных областей одной науки на границах их областей применения. Такое согласование представляет значительно большую проблему, чем вопросы внутри областей применимости стандартных приемов. Мы поясним это на старом примере, приведшем к кризису классической электродинамики.

Классическая электродинамика основана на уравнениях Максвелла для пары E, B электрического и магнитного полей:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} B &= \tfrac{1}{c}(E'_t + 4\pi j), \\ \operatorname{rot} E &= -\tfrac{1}{c}B'_t, \\ \operatorname{grad} E &= 4\pi\rho, \\ \operatorname{grad} B &= 0. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Эти уравнения точно описывают все электродинамические явления в макроскопических размерах, что включает в себя законы Кулона, Ампера и Фарадея.[7] Однако если мы рассмотрим задачу о движении электрона в кулоновском поле ядра атома в рамках этих уравнений, при естественных

[6] Причина этого в принципиальной несовместимости языков: формализм теории гравитации локален — это теория частицы в поле, а формализм квантовой физики — нелокален, там нет состояний отдельных частиц, а есть совместные состояния.

[7] Два последних вытекают из первых двух уравнений Максвелла, вывод закона Кулона приведен ниже по книге [17].

предположениях мы придем к выводу о том, что он должен непрерывно излучать энергию, что делает невозможным наблюдаемую в природе стабильность атомов. Так устанавливаются границы масштабируемости классических моделей. Мы в принципе не можем рассчитывать на построение, например, модели химических реакций на основе классической физики, поскольку она не может дать правильного описания даже для простейших объектов химии.[8]

3.3.1. Конструктивизм и границы применимости классических моделей

Сила моделей, основанных на классической физике, — в законах механики и термодинамики, выраженных в уравнениях. Вычислительные приемы типа метода прогонки, направленные на возможно более точное приближение к их точным решениям, имеют смысл только при условии безусловной применимости этих уравнений. Любое уравнение, которому подчиняется реальный процесс, имеет ограничение по пространству-времени, то есть его нельзя применять при слишком малых и слишком больших временах и расстояниях. И в этом смысле не существует чисто классических явлений: при уменьшении зерна пространственной разрешимости мы автоматически попадаем в сферу действия квантовых законов. Однако для нас сейчас будет более важна роль коллективных эффектов при классическом моделировании. Классическая механика основана на представлении о точечной частице, на которую действует некое поле. Это поле, в свою очередь, порождается многими частицами, но индивидуальность их вкладов в поле полностью теряется при переходе к уравнениям. Таким образом, классические модели суть модели индивидуального поведения частиц, и их можно успешно применять только для описания индивидуальных поведений отдельных частиц, пусть даже их количество будет очень велико.[9] Границы применимости классических моделей определяются областью действия исходных уравнений.

[8]Можно было бы считать, что для расчета орбиты электрона в атоме вообще нужно с самого начала использовать электродинамику с учетом релятивизма и т.п. Этот путь никто не проходил до конца, поскольку он является невообразимо сложным. Вообще, современная физика приняла знакомый нам вид только благодаря тому, что ее создатели всякий раз выбирали наиболее эффективные алгоритмы для решения любой задачи. То есть алгоритмический критерий всегда лежал в основе физики, хотя его специально никто не отмечал — это стало актуально только теперь.

[9]Например, классические модели хорошо работают в термодинамике, а также в механике сплошных сред, гидро- и аэродинамике. Но они становятся ненадежными, как только роль начинают играть фазовые переходы, кластеризация и прочие коллективные эффекты, не сводящиеся к простому набору индивидуальных поведений.

Например, классическая модель очень точно предсказывает движение одного тела в гравитационном поле нескольких планет в том случае, если мы очень точно знаем само движение этих планет. Но классическая модель сразу становится ненадежной, как только роль приобретают коллективные эффекты, например, формирование самих планет. Сложность проблемы многих тел в классической механике имеет прямой аналог в квантовой. Масштабирование квантовой модели основано на отказе от представления о поле как о непрерывном носителе потенциала, и переходе к так называемым квантам этого поля. Продвижение по этому пути в рамках стандартного математического аппарата приводит к квантовой электродинамике, основанной на представлении о носителях электромагнитного поля — фотонах. Вместо действия абстрактного потенциала мы получаем обмен отдельными фотонами между движущимися заряженными частицами, что представляет собой фундаментальный шаг вперед по сравнению с классической электродинамикой, давая возможность, например, посчитать очень точно магнитный момент электрона. Однако главную проблему в квантовой электродинамике представляют коллективные эффекты.

Невозможность сведения коллективного поведения к набору индивидуальных эволюций можно понять на простейшем примере классической динамики твердого тела. В теоретической механике выводится описание движения твердого тела в терминах мгновенной оси вращения и ее движений в пространстве — прецессии и нутации. При этом используется понятие связей между отдельными элементами твердого тела. Такие связи не могут быть сведены к действию некоторого потенциала, порождаемого отдельными атомами, составляющими твердое тело. Представим себе, что мы хотим построить модель классической механики, которая бы правильно описывала формирование твердого тела через кластеризацию отдельных его атомов, находящихся в поле действия некоторого потенциала. Тогда такая модель должна будет объяснить появление жестких связей внутри твердого тела, которых не было в ансамбле первоначально свободных атомов. Движение твердого тела можно задать, взяв только три точки общего положения внутри него, в то время как для ансамбля отдельных атомов надо знать состояние каждого! Это означает наличие некоторого качественного скачка при переходе к твердому телу, который обычно называют фазовым переходом. Если в воображаемой классической модели утрачивается информация об индивидуальных состояниях атомов, такая модель уже не может претендовать на точность описания процесса. В случае фазового перехода в ансамбле отдельных атомов их индивидуальные состояния переходят не в классическое состояние твердого тела, а в квантовое состояние ансамбля составляющих его частиц, а также фотонов, испущенных при ассоциации

атомов в твердое тело. Для того чтобы не утратить полноту информации при таком фазовом переходе, мы должны рассматривать именно квантовое состояние всех атомов и фотонов, а не просто координаты и импульсы трех точек в получившемся твердом теле. Это говорит об ограниченности моделей, основанных на классической механике.[10]

Главным препятствием в применении моделей классической физики являются многочастичные эффекты. Такие эффекты ведут к образованию новых частиц или к распаду имеющихся частиц на составные части. Именно наличие таких процессов делает неэффективным применение моделей классической физики.

[10]Обыкновенный фазовый переход — не единственный пример такого рода. Возможны и иные виды строго повторяющихся движений, приводящих к формированию ансамблей, которые ведут себя как одна частица. Например, это могут быть вихревые потоки или волны в жидкости. Главная черта таких движений — их цикличность, позволяющая применять к ним понятие движения по инерции. Эвристика таких квазичастиц очень плодотворна при квантовом описании ансамблей с особыми свойствами типа сверхпроводимости (боголоны, ротоны).

Глава 4

Квантовые процессы

Эта глава не является введением в квантовую физику. Здесь всего лишь точно описывается только ее формализм с кубитовой точки зрения, так что читатель, знакомый с квантовой теорией, сможет переписать любую ее часть на этом языке. Обычно в литературе по физике используется традиционные обозначения из теории функций, например, волновую функцию записывают как $\Psi(x)$, что вызывает коллизию со значением волновой функции в конкретной точке x, и потому для него используется интегральное представление $\int \Psi(y)\delta_x(y)\ dy$. Эти традиционные обозначения удобны для ручных вычислений, при которых разрешение таких коллизий не создает проблемы для человека. Однако для компьютерного моделирования необходима большая степень формализации основных понятий. Более того, формализм должен быть приспособлен к тому, что мы будем работать только с конечными числами, даже если в используемых нами формулах можно подставлять бесконечные величины. Особенно это касается квантовой электродинамики, для которой здесь предлагается формальная система обозначений кубитового типа.

4.1. Основные положения одночастичной квантовой механики

Главный постулат квантовой механики состоит в том, что вся динамика любой системы определяется ее волновой функцией, которая является комплексной функцией от координат все частиц, составляющих эту систему:

$$\Psi(t, r_1, r_2, \ldots, r_n).$$

Здесь r_j — координаты частицы j (имеются в виду не только пространственные координаты частиц, но и их спиновые координаты). Эта волновая функция должна рассматриваться как вектор в гильбертовом пространстве состояний n-частичной системы. Значения этой функции называются

амплитудами, соответствующими пребыванию частицы в данный момент времени t в таком состоянии, при котором для каждого $j = 1, 2, \ldots, n$ частица j имеет координаты r_j. Такая трактовка состояния в виде вектора сразу ведет к нетривиальному следствию: любая линейная комбинация состояний снова является некоторым возможным физическим состоянием данной системы. Таким образом, множество состояний обладает свойством линейности, и это означает, что любое уравнение, которому подчиняется вектор Ψ, должно быть линейным. Этот принцип называется принципом суперпозиции, и из него вытекает существование особого процесса, называемого интерференцией амплитуд, который не имеет прямого аналога в классической физике (не считая волновую физику, где интерференция проявляется как коллективный эффект, к чему мы вернемся).

Интерференцию амплитуд проще всего продемонстрировать, применяя матрицы. Представим себе, что мы выбрали базис в гильбертовом пространстве состояний, и представляем всякий вектор Ψ в виде некоего столбца координат этого вектора в данном базисе. Тогда из принципа суперпозиции вытекает, что состояние в следующий момент времени $t + \delta t$ можно найти, применив к состоянию в момент времени t некий линейный оператор U, называемый оператором унитарной эволюции (дальше мы увидим, что он должен быть не только линейным, но и унитарным). Этот факт можно выразить на языке матричного умножения так:

$$\begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \ldots & u_{1,n} \\ u_{2,1} & u_{2,2} & \ldots & u_{2,n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ u_{n,1} & u_{n,2} & \ldots & u_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \\ \ldots \\ \psi_n(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1(t+\delta t) \\ \psi_2(t+\delta t) \\ \ldots \\ \psi_n(t+\delta t) \end{pmatrix}. \tag{4.1}$$

То есть любая амплитуда $\psi_j(t + \delta t)$ может быть найдена по формуле

$$\psi_j(t+\delta t) = \sum_{i=1}^{n} \psi_i(t) u_{j,i}. \tag{4.2}$$

Формула (4.2) означает, что для нахождения амплитуды в некоторой точке в следующий момент времени надо просуммировать все амплитуды во всех точках в предыдущий момент, предварительно умножив их на соответствующие амплитуды перехода из этих точек в исходную. Значит, движение квантовой частицы можно представлять себе как движение некоей среды, где амплитуда в любой точке складывается из вкладов, которые вносят в эту точку движения этой частицы из всех других точек. При этом каждый вклад берется с комплексным весом, соответствующим описанному переходу из

точки в точку. Это представление квантовой частицы в виде среды порождает аналогию квантовой физики с гидродинамикой, которую мы еще будем рассматривать.

А теперь рассмотрим два последовательных перехода, которые осуществляются с помощью того же оператора эволюции U: от момента t до момента $t + 2\delta t$. Тогда у нас получится: $\Psi(t + 2\delta t) = U^2\Psi(t)$. Выписав подробнее, мы получим $\psi_j(t + 2\delta t) = \sum_{i,k} \psi_i(t) u_{i,k} u_{k,j}$. Это означает, что квантовая частица может двигаться, вообще говоря, вдоль произвольной траектории, а не только по прямой, и ее амплитуда в любой точке есть результат суммирования амплитуд по всем путям, ведущим из каждой точки в данную. При этом вклад в сумму каждого пути получается умножением элементов матрицы эволюции U, соответствующих всем последовательным частям этого пути (мы представляем путь в виде ломаной, и части — это ее звенья). Таким образом, амплитуда считается как сумма по всем путям, а вдоль каждого пути это — произведение амплитуд переходов по всем его последовательным частям.

Это правило справедливо везде, в том числе и в квантовой электродинамике, где процессы описываются диаграммами. Оно в точности соответствует формуле для полной вероятности сложного события в теории вероятностей, с той лишь разницей, что в теории вероятностей величины вещественные и неотрицательные, а у нас здесь — комплексные. Такая аналогия наводит на мысль о возможности статистической интерпретации квантовой теории, а также на возможность отказа от комплексных чисел при ее описании, — к этим идеям мы также вернемся позже.

Классическим величинам в квантовой теории соответствуют операторы. Величине координаты x соответствует оператор умножения на эту координату: $x : f(x) \to xf(x)$, вектору $\bar{r} = (x, y, z)$ — оператор $\bar{r} : f(x, y, z) \to (xf(x, y, z),\ yf(x, y, z),\ zf(x, y, z))$, импульсу p_x вдоль координатной оси x — оператор импульса $p_x = \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x}$, полному импульсу $\bar{p}$ — оператор $\bar{p} = \frac{h}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$, энергии — оператор энергии $\frac{p^2}{2m} + V(x)$, где V — потенциальная энергия частицы. Оператор энергии называется гамильтонианом. При этом мы принимаем обычные правила перехода к векторным величинам: например, оператор квадрата модуля координаты действует как $|r|^2 : f(x, y, z) \to (x^2 + y^2 + z^2)f(x, y, z)$, оператор квадрата импульса — как $p^2 : f \to -h^2\Delta f$ (то есть квадрат трактуется нами как скалярный квадрат), моменту импульса $\bar{r} \times \bar{p}$ — оператор момента, координаты которого получаются по правилу взятия векторного произведения из координат его сомножителей-операторов, и т. д.

Преобразование Фурье от волновой функции называется импульсным представлением волновой функции:

$$\Phi(p) = \int_R e^{-\frac{ipx}{h}} \Psi(x) dx, \tag{4.3}$$

где обратный оператор выглядит так:

$$\Phi(x) = \frac{1}{2\pi h} \int_R e^{\frac{ipx}{h}} \Phi(p) dp.$$

Полный переход к импульсному представлению и обратно в трехмерном пространстве имеет вид

$$\Phi(p) = \int_{R^3} e^{-\frac{ip \cdot R}{h}} \Psi(R) d^3R,$$

$$\Psi(R) = \frac{1}{(2\pi h)^3} \int_{R^3} e^{\frac{ip \cdot R}{h}} \Phi(p) d^3p.$$

При этом если волновая функция зависит от 3 переменных, можно переходить к ее импульсному представлению по каждой из координат независимо от других, например, можно рассмотреть функцию вида $\Phi(x, p_y, z)$, или $\Phi(p_x, y, p_z)$, и т. д. Подчеркнем, что волновая функция не меняется при переходе к ее импульсному представлению — она представляет собой тот же самый вектор в гильбертовом пространстве состояний. Импульсное представление есть просто запись этого вектора в другом базисе, в котором базисные векторы — это не дельта-функции, как при координатном представлении, а функции вида $\exp(ipR)$. Мы могли бы выбрать какой-либо иной базис, например, соответствующий собственным векторам эрмитова оператора суммы $R + p$ (импульс плюс координата), и завести соответствующее представление волновых функций, если это необходимо. Таким образом, все манипуляции, связанные с переходом к импульсному представлению, есть простая операция изменения базиса. Использование таких переходов есть часть стандартного формализма, и из этого следует важный для дальнейшего вывод: трудности с записью тех или иных взаимодействий в разных базисах свидетельствуют о серьезных проблемах.

Важнейшим правилом квантовой механики является правило Борна, которое гласит, что квадрат модуля волновой функции есть плотность вероятности обнаружения частицы в точке x:

$$p(x) = |\Psi(x)|^2. \tag{4.4}$$

Это правило инвариантно относительно базиса пространства состояний в том смысле, что плотность вероятности обнаружить импульс частицы равным p есть квадрат модуля импульсного представления волновой функции.

Правило Борна является сутью квантовой теории. Оно утверждает, что с ее помощью мы можем предсказать только вероятности наступления того или иного события, но не сами эти события, как в классической физике. Использование математического понятия вероятности автоматически предполагает существование так называемого пространства элементарных исходов, каждый из которых определяет уже не вероятность, а точное наступление события. Идеология копенгагенской квантовой теории предполагает, что нам принципиально недоступно пространство элементарных исходов. Этот запрет на доступ к элементарным исходам обычно формулируют как отсутствие скрытых параметров. Этот идеологический постулат[1] имеет смысл только в рамках классического математического аппарата, лежащего в основе квантовой теории. В дальнейшем мы рассмотрим конструктивную трактовку вероятности в квантовой теории, при которой элементарные исходы принадлежат административной части модели. В настоящее время появились эксперименты, связанные с квантовой нелокальностью, точное рассмотрение которых требует явных манипуляций с элементарными исходами и, тем самым, выхода за пределы стандартной теории. Мы будем обсуждать это в главе 6.

Динамика волновой функции в стандартном формализме зависит от степени изолированности рассматриваемой системы, причем не существует точного определения изолированности. В случае изолированной системы динамика описывается уравнением Шредингера, в случае контакта с окружением — измерениями волновой функции. Измерение в данном базисе пространства волновых функций есть случайная величина, принимающая значения из векторов этого базиса с плотностью вероятности, задаваемой правилом Борна. Окружение всегда считается классической системой, подчиняющейся законам классической физики, и измерение системы дает вероятностное распределение ее состояний, подчиняющееся правилу Борна.

[1] Другим постулатом того же статуса является представление о тождественности элементарных частиц одного типа.

Уравнение Шредингера имеет вид

$$ih\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi, \tag{4.5}$$

где H есть оператор энергии частицы (или системы частиц). В простейшем случае частицы в потенциальном поле оператор энергии выписан выше. В более сложных случаях (несколько частиц, наличие векторного потенциала электромагнитного поля) оператор энергии получается из выражения для классической энергии с помощью замены всех физических величин на соответствующие им квантовые операторы. В частности, из уравнения Шредингера вытекает, что в случае постоянства потенциальной энергии во времени общее решение уравнения Шредингера дается выражением

$$\Psi(x,t) = \exp\left(-\frac{i}{h}Ht\right)\Psi(x,0). \tag{4.6}$$

Экспонента от оператора определяется как соответствующий ряд, составленный из операторов. Это же выражение можно использовать и для непостоянных гамильтонианов, только экспоненту надо тогда трактовать как так называемую хронологическую экспоненту (см. [48]).

По существу, мы описали весь стандартный формализм квантовой теории. Из этих основных положений вытекают некоторые другие (например, касающиеся измерений и возможностей выбора базисов), которые мы рассмотрим в кубитовом формализме. Все выводы копенгагенской квантовой теории получаются из этих основных положений с помощью разного рода эвристик и аналогий с классической физикой; математический аппарат стандартной квантовой теории исчерпывается изложенным в этом параграфе.

4.1.1. Пример эвристики: серия Бальмера для атома водорода

В качестве примера физической эвристики мы приведем здесь принадлежащий Н. Бору вывод выражения для энергетических уровней электрона в атоме водорода, установленного эмпирически И. Бальмером с помощью обработки данных спектроскопии. Уровни энергии Бальмера имеют вид $E_n = -\alpha/n^2$ для некоторой константы α, $n = 1, 2, \ldots$.

Помимо представления об атоме как о системе из положительно заряженного протона и отрицательно заряженного электрона (Э. Резерфорд), нам понадобятся три основные эвристические предположения, которые ниоткуда не вытекают:

- электрон в атоме движется в соответствии с классикой, по круговой орбите,
- его импульс p связан с длиной его волны λ соотношением $p = \frac{2\pi h}{\lambda}$,
- на орбите электрона укладывается целое число длин волн.

Второе предположение вытекает из гипотезы де Бройля о том, что движущаяся с импульсом $\bar{p}$ частица имеет волновую функцию вида $\psi = \exp(i\bar{p}\bar{x}/h)$. Первое предположение даст нам формулу для ускорения электрона в виде $a = v^2/r$, где v — его линейная скорость, r — расстояние до протона; кулоновский закон даст выражение для силы, действующей на электрон (протон в силу большой массы неподвижен): $am = F = e^2/r^2$. Полная энергия электрона $E = \frac{p^2}{2m} - e^2/r$. Согласно второму предположению, мы можем написать выражение для импульса электрона $p = vm = \frac{2\pi h}{\lambda}$. Наконец, по третьему предположению, обозначая через n ($n = 1, 2, \ldots$) число волн, укладывающееся на круговой орбите электрона, и снабжая энергию, радиус и импульс нижним индексом n, соответствующим уровню энергии n, мы получим $n\lambda_n = 2\pi r_n$, откуда следует, что r_n пропорционально n^2, а E_n пропорционально $-1/n^2$, что и дает бальмеровскую серию.

Н. Бор вывел этот результат, не используя не только уравнения Шредингера (оно было открыто позже), но и без прямого использования понятия волновой функции. Этот пример говорит о необычайной эффективности вычислительных эвристик, а также о том, что идея избавиться от понятия волновой функции не может считаться провальной. Понятие волновой функции (как и представление о тождественности одотипных частиц) удобно только для простых систем, где мы можем многократно воспроизводить одно и то же состояние, так что заработает правило Борна. Тогда волновая функция очень удобна для вычислений. Однако ей нельзя приписывать фундаментальный статус всегда; для сложных систем, где нельзя даже надеяться на воспроизводство одинаковых состояний в обозримое время, волновая функция должна быть заменена подходящей алгоритмической эвристикой, в противном случае дальнейшее развитие квантовой теории станет невозможным.

4.1.2. Кубитовый формализм

А сейчас займемся важным моментом перехода от волновой функции к конечному вектору. Эта процедура называется переходом к кубитовому

представлению волновой функции. Собственно кубиты в данном случае играют декоративную роль, а сейчас важна процедура дискретизации волновой функции. Дискретизация волновых функций имеет глубокий смысл, так как она связана с наличием возможного зерна в конфигурационном пространстве. Если мы предположим, что конфигурационное пространство не является делимым до бесконечности, а в нем существует наименьшая ненулевая длина $d > 0$, то у нас получится, что вместо непрерывной волновой функции надо рассматривать ее дискретное приближение, которое на самом деле будет уже не приближением, а точным выражением, то есть приближением надо будет считать как раз непрерывный вариант волновой функции. Существование такой дискретизации пространства косвенно вытекает из расходимости рядов в квантовой электродинамике (см. ниже), а также из свойств волновых функций даже одной частицы при уменьшении зерна пространственного разрешения (это мы рассмотрим в параграфе, посвященном фейнмановским интегралам по траекториям). Но главное, для чего на самом деле нужно дискретное представление, — это конструктивизация квантовой теории. Необходимость рассматривать и работать именно с приближениями координат частиц, а не с их вещественными «точными» значениями, ведет нас к кубитовому формализму.

Зерно пространственного-временного разрешения $d = (d_x, d_t)$ может и не быть абсолютной величиной, а зависеть от рассматриваемого процесса. Оно фактически определяет степень несовершенства методов классической математики, которыми мы поневоле будем пользоваться, даже при построении алгоритмов. Это зерно есть граница применимости одного такого аналитического метода, на одном шаге конструктивного приближения реального процесса (см. раздел «Конструктивный математический анализ»).

Пусть у нас имеется одна частица, координаты которой принимают значения из некоторого конфигурационного пространства R (для одномерной частицы это вещественные числа, но в данном случае структура R нам не очень важна). Разобьем R на конечное число сегментов $D_1, D_2, \ldots, D_m$ и рассмотрим приближение функции Ψ ступенчатой функцией $|\Psi\rangle$, которая принимает на сегменте D_j некоторое значение $\lambda_j \in C$. Пусть $|j\rangle$ обозначает характеристическую функцию сегмента D_j. Тогда мы можем записать формальное равенство

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^{m} \lambda_j |j\rangle. \tag{4.7}$$

Рассмотрим линейное пространство, порожденное функциями $|j\rangle$. Если ввести скалярное произведение функций по стандартному правилу $(g, f) =$

$= \int \bar{f}(x)g(x)dx$, у нас получится, что $|j\rangle$ образуют ортогональный базис этого пространства. Если мы нормируем их (это можно сделать, зафиксировав λ_j и подбирая нужные D_j), то этот базис будет ортонормированным. Тогда равенство (4.7) будет являться разложением вектора $|\Psi\rangle$ по ортонормированному базису, состоящему из векторов $|j\rangle$. Представление волновой функции в виде (4.7) является корректным, в отличие от двусмысленного выражения $\Psi(x)$, поскольку в последнем выражении переменная x является свободной, и потому неясно, что выражает запись $\Psi(x)$ — функцию Ψ или ее значение в конкретной точке x. Подобные тонкости не важны в классической математике, так как при аналитических вычислениях свободную переменную всегда можно связать логическим квантором, но в конструктивной математике они важны. При построении алгоритма мы должны четко различать саму функцию, включающую все свои значения, как в (4.7), и ее конкретное значение в фиксированной точке.

Теперь мы можем установить соответствие квантового формализма и линейной алгебры. Будем через $|a\rangle$ понимать запись вектора a в конечномерном гильбертовом пространстве состояний в виде столбца его координат в выбранном заранее базисе. Тогда действие линейного оператора A на данный вектор выразится как результат матричного умножения $A|a\rangle$, где под A понимается матрица A в данном базисе. Договоримся также считать, что $\langle a|$ есть вектор — строка, полученная из $|a\rangle$ транспонированем и комплексным сопряжением элементов. Эта операция — транспонирование и комплексное сопряжение — называется просто сопряжением, когда речь идет о матрицах. Будем также сливать две рядом стоящие вертикальные черты в обозначениях. Тогда скалярное произведение векторов a и b запишется как $\langle a|b\rangle$. Запись $\langle a|A|b\rangle$ можно толковать двояко: либо как $\langle a|(A|b\rangle)$, либо как $(\langle a|A^*)|b\rangle$. Но если матрица A самосопряженная, то есть $A = A^*$, двойственность исчезает, и мы можем использовать выписанное выражение без скобок. Самосопряженные матрицы еще называют эрмитовыми. Матрицы вида $\exp(iH)$, где H — эрмитова, называются унитарными. Приведением к диагональному виду легко доказывается, что матрица U унитарна тогда и только тогда, когда $U^{-1} = U^*$, или, что то же самое, когда матрица U сохраняет все расстояния в гильбертовом пространстве.

Можно определить измерение состояния $|\Psi\rangle$ в ортонормированном базисе $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \ldots, |\phi_N\rangle$ как случайную величину, принимающую значения $|\phi_j\rangle$ с вероятностями $|\langle\phi_j|\Psi\rangle|^2$. Это есть переформулировка борновского правила. Таким образом, измерение задает случайный процесс, который называется коллапсом волновой функции: при этом процессе происходит переход от состояния $|\Psi\rangle$ к одному из состояний $|\phi_j\rangle$, причем для каждого

$j = 1, 2, \ldots, N$ нам известна исключительно вероятность перехода в это состояние, и больше ничего. В этом и состоит суть стандартной, или копенгагенской, квантовой теории. Она является полной в том смысле, что попытка ее изменить, например, ввести, помимо волновой функции $|\Psi\rangle$, еще и некоторые другие параметры, определяющие состояние (так называемые скрытые параметры), неизменно приводит к отказу от использования стандартного аппарата вообще, и при отсутствии альтернативного аппарата такая попытка превращается в ничто.

Копенгагенская квантовая механика обладает всей гибкостью, необходимой для полной физической теории одной-двух частиц. Например, любой физической величине ставится в соответствие эрмитов оператор A, такой что классические значения этой величины являются собственными числами этого оператора. Измерение этой величины есть измерение состояния рассматриваемой системы в базисе собственных векторов оператора A. Если у двух операторов общий набор собственных функций (это то же самое, что их коммутативность), то это означает, что данные величины могут быть измерены одновременно (с одинаково высокой точностью). Примером может служить энергия частицы и проекция оператора момента импульса на одну из координатных осей (чаще выбирают z). Если же операторы не имеют общей системы собственных функций, то соответствующие им величины не могут быть измерены одновременно. Например, координата и импульс вдоль этой же оси не могут быть измерены одновременно. Действительно, нетрудно проверить, что если мы выбираем сегменты D_j как последовательные отрезки равной длины, то с точностью до коэффициента матрица оператора координаты x будет иметь вид

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 2 & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & 3 & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}, \tag{4.8}$$

в то время как матрица оператора импульса для той же координатной оси имеет вид

$$DFT \begin{pmatrix} -h^2\, 1^2/2m & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & -h^2\, 2^2/2m & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & -h^2\, 3^2/2m & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix} DFT^{-1}, \tag{4.9}$$

где DFT обозначает дискретное преобразование Фурье (см. приложение — QFT). Числа $1, 2, \ldots$ взяты здесь для примера. Это просто числовые значения координаты или импульса в двоичном представлении. Действительно,

первое утверждение вытекает из определений непосредственно, а для доказательства второго заметим, что преобразование Фурье переводит дифференцирование в умножение на мнимую единицу и аргумент результата преобразования Фурье. Это свойство здесь и использовано для того, чтобы диагонализовать матрицу, соответствующую оператору импульса. Эта матрица будет диагональной в базисе, который получается преобразованием Фурье из исходного, так что у операторов координаты и импульса действительно нет общих собственных векторов. Разумеется, если рассмотреть, например, координату x и оператор импульса вдоль другой оси, например, p_y, то у таких операторов будет общая система собственных векторов, и их можно измерить одновременно.

Одновременное измерение здесь трактуется как измерение обоих величин с одинаковой точностью. То есть возможность сколь угодно точно знать одновременно значения и одной и другой величины. Если же отказаться от требования абсолютной точности, то, конечно, измерить можно любые две величины. При этом, если одна из них приняла определенное значение (то есть наш вектор состояния совпал с собственным вектором соответствующего этой величине оператора), то другая, вообще говоря, будет иметь некоторое вероятностное распределение значений в соответствии с правилом Борна. Рассмотрим, для примера, двумерное гильбертово пространство, в котором измеряется «координата», а затем «импульс» частицы. Я заключаю название физических величин в кавычки для того, чтобы подчеркнуть, что рассматриваются не настоящие координата или импульс, а их самые грубые приближения, вытекающие из того, что частица может занимать только два пространственных положения, а не континуальный набор, как в стандартных курсах по физике. Поскольку при измерении «координаты» мы попадаем в одно из двух состояний $|1\rangle, |2\rangle$, а преобразование Фурье в двумерном случае имеет матрицу Адамара (с точностью до фазового сдвига)

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix},$$

то вероятность получить каждое из возможных значений «импульса» 1 или 2, будет равна $1/2$. «Импульс частицы» при условии, что эта частица способна занимать только два пространственных положения, $|0\rangle$ или $|1\rangle$, означает, что эта частица либо совершает прыжок из одного положения в другое, либо стоит на месте. Физическая интуиция дает нам верное понимание этого понятия в такой необычной ситуации. Как видим, можно приписать понятию импульса частицы совершенно определенное понимание,

пусть и не сводящееся к одному числу, но тем не менее строгое и корректное в том смысле, что с этим пониманием можно работать дальше. Мы сделали это, опираясь на кубитовый формализм, то есть на специальный математический прием.[2] Кубитовый формализм, как мы видим, более надежен, чем стандартный формализм волновых функций. Он обладает большими выразительными возможностями, так как позволяет трактовать операторы как конкретные эрмитовы матрицы и, таким образом, явно использовать алгебраические приемы. Кубитовая техника более требовательна, чем традиционная аналитическая, так как она явно содержит некое зерно разрешения конфигурационного пространства. Любой изъян формализма, который можно легко скрыть, используя аналитическую технику, становится явным при использовании техники кубитов, в чем мы убедимся далее на примере квантовой электродинамики. Кроме того, предположение о наличии зерна пространственного разрешения гораздо ближе к реальности, чем предположение о бесконечной делимости пространства. Ввиду этого, я буду в дальнейшем стараться применять именно кубитовую запись квантовых объектов, не оговаривая этого специально. Рассмотренная нами ситуация вообще типична в том смысле, что самым коротким путем к численному результату является простая манипуляция с математическим объектом; все то, что понимают под физической интуицией, обязательно должно сводиться к такой манипуляции. Самостоятельное существование некой физической интуиции, не оформленной как такая манипуляция, есть верный признак отсталости используемой математики.

Итак, копенгагенская квантовая механика обладает полным арсеналом для рассмотрения одной или двух частиц, так как две частицы можно свести к одной, выбирая в качестве начала системы координат их общий центр масс. Однако в более сложных задачах она неприменима. Трудности начинаются уже в формально одночастичных задачах, но содержащих измерения, см. пример 2 из 2.4.2. Физически измерение означает взаимодействие рассматриваемой частицы с окружением, состоящим из очень большого числа частиц и потому проявляющего классические свойства. То есть фактически задача об измерении не является уже одночастичной задачей. Это проявляется в виде так называемой декогерентности, то есть распаде квантового состояния при контакте его с окружающими частицами, не входящими в рассматриваемый ансамбль.

[2] Я предлагаю читателю рассмотреть возможности применения для такой задачи эвристику стандартного математического анализа (то есть того, что принято понимать под физической интуицией), когда скорость рассматривается как предел $\Delta s/\Delta t$, и т. д.

4.1.3. Тензорные произведения

Мы подошли к ядру гильбертова формализма квантовой механики — описанию многочастичных систем с помощью тензорных произведений пространств состояний. Эта конструкция символизирует всю мощь классической математики, поскольку дает возможность предсказать явление, которое уже невозможно строго описать с помощью стандартного подхода: существование запутанных квантовых состояний. Мы должны тщательно изучить формализм тензорных произведений; с этой целью я не только поместил ниже описание конструкции квантового компьютера, выявляющую значение этого формализма, но и посвятил ему приложение к этой книге. Важность понимания этой конструкции еще и в том, что именно ее нам предстоит существенно модифицировать при переходе к конструктивной квантовой механике, вводя понятие связей, что будет сделано в дальнейшем.

Ключевой элемент стандартного формализма многочастичной квантовой механики — взятие тензорного произведения пространств состояний отдельных частиц. Состояние ансамбля нескольких частиц в квантовой теории не сводится к набору их квантовых состояний, а принадлежит тензорному произведению пространств состояний отдельных частиц, составляющих данный ансамбль. В этом состоит фундаментальное отличие квантовой теории от классической. Пусть $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \ldots, \mathcal{H}_n$ — пространства квантовых состояний частиц $1, 2, \ldots, n$ соответственно. Тогда квантовые состояния ансамбля данных частиц составляют тензорное произведение $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \bigotimes \mathcal{H}_2 \bigotimes \ldots \bigotimes \mathcal{H}_n$, которое мы сейчас определим. Пусть $b_1^j, b_2^j, \ldots, b_{k_j}^j$ есть некоторый базис пространства $\mathcal{H}_j$, $j = 1, 2, \ldots, n$. Тогда базисом пространства $\mathcal{H}$, по определению, будет набор всех формальных произведений вида

$$b_{i_1}^1 \bigotimes b_{i_2}^2 \bigotimes \ldots \bigotimes b_{i_n}^n,$$

где знак тензорного произведения часто опускается. Например, если у нас только два пространства и оба представляют собой состояния кубитов — первого и второго, то в их произведении базис будет таким: $|0\rangle|0\rangle$, $|0\rangle|1\rangle$, $|1\rangle|0\rangle$, $|1\rangle|1\rangle$. Часто в дираковских обозначениях $\rangle|$ также опускается и пишут просто $|00\rangle$ и т.д. Теперь мы можем отождествить волновую функцию вида $\Psi(r_1, r_2, \ldots, r_n)$ с вектором в тензорном пространстве $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \bigotimes \mathcal{H}_2 \bigotimes \ldots \bigotimes \mathcal{H}_n$ где всевозможные значения r_1 принадлежат базису $\mathcal{H}_1$, и т.д. Если у нас есть состояния $|\psi_j\rangle \in \mathcal{H}_j$ $j = 1, 2, \ldots, n$, то их тензорное произведение $|\psi_1\rangle \bigotimes |\psi_2\rangle \bigotimes \ldots \bigotimes |\psi_n\rangle$ определяется так: надо разложить каждое состояние по базису и перемножить эти записи, считая,

что знак тензорного произведения $\bigotimes$ обладает всеми свойствами произведения, кроме коммутативности, то есть дистрибутивен по отношению к сложению и допускает вынесение числового множителя. Такое произведение состояний принадлежит тензорному произведению пространств.

Если $A^j : \mathcal{H}_j \to \mathcal{H}_j$ — линейные операторы, мы определим их тензорное произведение $A = A^1 \bigotimes A^2 \bigotimes \ldots \bigotimes A^n$ так: сначала определим этот оператор естественным образом на базисных векторах $\mathcal{H}$, $A(b^1_{i_1} \bigotimes b^2_{i_2} \bigotimes \ldots \bigotimes b^n_{i_n}) = A^1(b^1_{i_1}) \bigotimes A^2(b^2_{i_2}) \bigotimes \ldots \bigotimes A^n(b^n_{i_n})$, а затем распространим этот оператор по линейности на все пространство $\mathcal{H}$.

Не всякий вектор из $\mathcal{H}$ имеет вид тензорного произведения векторов из отдельных пространств. Например, в случае двух кубитов вектор $|00\rangle + |11\rangle$ представить в таком виде невозможно. Такие состояние называются запутанными, в знак того, что их нельзя свести к комбинации (произведению) отдельных состояний. Именно наличие запутанных состояний делает квантовую физику многих частиц принципиально более сложной, чем классическая, где нет такого понятия как запутанность. С другой стороны, запутанность не имела бы никакого особого смысла, если бы мы представляли частицу как точечную, то есть классически. Таким образом, запутанность есть удивительное, чисто квантовое явление. В главе 6 мы увидим, что оно приводит к макроскопическим следствиям. Таким образом, квантовую механику нельзя свести к поправкам к классической. Она одна дает нам ключ к пониманию наблюдаемой картины мира.

Если мы работаем с обычной записью волновых функций $\Psi(r_1, \ldots, r_n)$, тензорное произведение надо трактовать как обычное произведение $\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\ldots\psi_n(r_n)$. Смысл математического определения, данного нами, состоит в том, что оно действует в кубитовом формализме, который полностью адекватен квантовой теории, поскольку включает в себя зерно пространственного разрешения: мы используем это зерно для выбора базиса $b^j_1, \ldots$ для каждой частицы. Например, мы можем считать, что b^1_1 означает нахождение первой частицы в точке 1, b^1_2 — нахождение ее в точке 2, и т. д. При этом зерна для разных частиц могут, вообще говоря, иметь разный размер. Также и частица сама по себе может быть целым ансамблем, состоящим из более мелких частиц, так что ее пространство тоже получается как тензорное произведение, и т. д.

4.2. Фейнмановские интегралы по путям

Замечательным принципом квантовой физики является принцип соответствия, согласно которому каждой физической величине классической физики соответствует в квантовой теории некоторый эрмитов оператор,

действующий в пространстве состояний частицы, причем это соответствие таково, что для больших действий квантовая динамика полностью переходит в динамику классическую. Без классической физики не может существовать квантовая — в самом сильном смысле этого слова. Не существует «чисто квантовой» теории — она по необходимости должна содержать в себе классическую физику, хотя бы потому, что процедура измерения невозможна без измерительного устройства, подчиняющегося классическим законам.

Эта невозможность отделить квантовую теорию от классической имеет и другой смысл, относящийся к области эвристики. Эвристика в стандартной квантовой теории (а также в обыкновенной физике) есть неформализованная система понятий и соглашений, определяющая, как именно мы должны применять законы и формулы, чтобы получить результаты, имеющие физический смысл.[3] Классическая эвристика стоит за всеми достижениями квантовой теории, включая квантовую элекгродинамику. Эта эвристика основана на понятии точечной частицы; мы уже познакомились с ней на примере получения бальмеровской серии для энергии элекгрона в атоме водорода.

Самый простой вид систем — это такие, которые либо состоят из одной частицы, либо сводятся к одной частице в том смысле, что нас вполне устраивает приближение их динамики, получающееся с помощью простой комбинации одночастичных систем. Примером является одна частица в потенциале. Реальный потенциал[4] является суммой вкладов от квантов этого потенциала — фотонов. Когда мы говорим о частице в потенциале — это приближение, основанное на том, что а) фотонов очень много, и б) источник не меняется в результате излучения одного фотона. Второй пример доставляет две взаимодействующие частицы с координатами r_1 и r_2. Если мы снова игнорируем кванты поля, можно ввести новые координаты $R = (r_1 + r_2)/2$, $r = r_1 - r_2$, и тогда наша система сведется к системе двух независимых частиц, то есть к простой комбинации одночастичных. Для трех частиц такой трюк уже не пройдет, поэтому случай трех частиц является своего рода оселком для проверки всяких гипотез в квантовой информатике.

В этом параграфе мы рассматриваем системы, сводимые к одночастич-

[3] Уместна аналогия с юридической системой, в которой наряду с законами имеются еще и процедуры применения этих законов. Эта ситуация не зависит от локализации. Это могут быть подзаконные акты, или прецеденты, или что-либо еще. Важно то, что этой «добавки» не избежать: без нее законы работать не будут.

[4] Мы всегда ведем речь о электромагнитном потенциале. Тем не менее, все сказанное о квантовании безусловно справедливо и для всех других потенциалов, включая ядерный и гравитационный. Для последнего вопрос лишь в том, чтобы правильно «разбить» наблюдаемое поле на кванты.

ным. Для таких систем в квантовом случае справедлива классическая эвристика, позволяющая переформулировать все выводы квантовой физики на языке, близком к классическому (далее мы называем такой язык квазиклассическим). Это позволяет нам использовать такие обороты как «траектория», «при движении частицы по данной траектории», «вклады от разных траекторий», и т. п., несмотря на то, что в формализме волновых функций нет никаких траекторий и никаких вкладов. Эта могучая эвристика стоит за всеми достижениями квантовой теории, достигнутыми к настоящему времени. Более того, при планируемой нами конструктивизации физики нам придется в любом случае заниматься этой эвристикой, поскольку никакой другой у нас просто нет. Первый шаг на этом пути сделал Р. Фейнман, сформулировавший квантовую механику на языке так называемых интегралов по траекториям.

Идея этого языка очень проста. Рассмотрим движение квантовой частицы из точки 1 в точку 2. Это движение может осуществляться разными способами, то есть по разным траекториям. Допустим, у нас есть некий алгоритм, позволяющий для данной траектории γ определять число $A(\gamma)$, а для разных таких чисел $A_1, A_2, \ldots, A_h$ определять их результат $K(A_1, A_2, \ldots, A_h)$, являющийся числом. Тогда чем больше модуль $|K|$, тем вероятнее, что квантовая частица, первоначально находившаяся в точке 1, переместится именно в точку 2, а не в какую-либо другую. Эта идея не содержит никаких чисел, а только оценки, но она указывает некую алгоритмическую схему, которая позволяет дать очень грубый ответ на вопрос: куда попадет частица, находившаяся в точке 1? Из этой схемы мы может сделать принципиальный вывод о том, что квантовая частица должна рассматриваться не как одна точка, путешествующая по пространству, а как набор точек, у каждой из которого имеется своя собственная траектория. Эти точки совершенно равноправны с точки зрения того, что каждая из них равным образом представляет исходную квантовую частицу, что дает нам право называть их экземплярами данной частицы.

Можно было бы уподобить квантовую частицу целой галактике, звезды которой и являются ее экземплярами. Но проведение такой аналогии требует некоторых усилий при описании взаимодействий. Для метода коллективного поведения эта аналогия будет видна из главы 5.

Такая ситуация влияет на смешанное рассмотрение систем нескольких частиц по методу Борна–Оппенгеймера. В этом методе ядра атомов, как тяжелые частицы, рассматриваются в рамках классической физики, а электроны — как квантовые объекты.

Ввиду вышесказанного я буду называть такой ансамбль экземпляров квантовой частицы роем, для того чтобы подчеркнуть его необычный ха-

рактер, при котором любой из экземпляров является полноправным представителем всего роя. Здесь сразу же возникает вопрос: что заставляет экземпляры держаться вместе и что произойдет, если какой-либо экземпляр удалится слишком далеко от основной части роя? Ответ на такой вопрос требует от нас признания экземпляров неуничтожимыми и явного механизма возврата в рой слишком удалившихся экземпляров, что будет обсуждаться в главе 5.

Было бы логично рассматривать каждый экземпляр как неуничтожимый, то есть приписывать каждому экземпляру частицы ее собственную историю. Мы вернемся к этому тезису позже. А пока будем считать экземпляры лишь вспомогательным инструментом для описания волновой функции Ψ и заново переопределять эти экземпляры через короткий промежуток времени δt, исходя из волновой функции $\Psi(t)$. Такой рой мы называем волновым в знак того, что у его экземпляров будет история, только ограниченная длительностью времени δt. Наша схема тогда будет выглядеть как итерация трех основных шагов:

- расчет волновой функции на основе состояния всех экземпляров волнового роя,
- новое определение экземпляров волнового роя,
- свободный полет экземпляров и изменение их амплитуд.

Чему в точности равна вероятность перехода $1 \to 2$? Этот вопрос тесно связан с тем, как взаимодействуют друг с другом экземпляры роя. Ответ на него известен: вероятность равна квадрату модуля величины K, и в дальнейшем мы установим, почему это должно быть именно так. Поскольку мы не связаны здесь необходимостью рассматривать историю каждого экземпляра и считать экземпляры неуничтожимыми, мы будем считать, что каждый экземпляр является носителем некоего специального комплексного числа, которое связано с этим экземпляром и называется его амплитудой. Для уточнения деталей этой схемы надо определить, что означают выражения $K(A_1, A_2, \ldots, A_h)$ и $A(\gamma)$. Первое выражение мы определим просто как сумму

$$K(A_1, A_2, \ldots, A_h) = \sum_{j=1}^{h} A_j.$$

Второе определим как

$$A(\gamma) = \frac{1}{A} \exp\left(\frac{i}{h} S[\gamma]\right),$$

где A — некая константа, а $S[\gamma]$ есть действие вдоль траектории γ, определяемое как

$$S[\gamma] = \int_{t_1}^{t_2} L(x_t, x, t)dt,$$

где лагранжиан рассматриваемой системы есть $L = E_{kin} - E_{pot}$, разность кинетической и потенциальной энергии.

Таким образом, функция K является комплекснозначной и ее можно выразить следующей формулой:

$$K(2,1) = \frac{1}{A} \int_{T(2,1)} \exp\left(\frac{i}{h} S[\gamma]\right) D\gamma, \tag{4.10}$$

где интегрирование по $D\gamma$ означает суммирование по множеству всех траекторий $T(2,1)$, ведущих от точки 1 к точке 2. Тогда волновая функция в момент времени t_2 может быть выражена через волновую функцию в момент времени t_1 по формуле

$$\Psi(x_2, t_2) = \int_{x_1} K(x_2, t_2; x_1, t_1)\Psi(x_1, t_1)dx_1 \tag{4.11}$$

для любых t_1, t_2, x_2. Здесь точка 1 имеет координаты x_1, t_1, точка 2 — координаты x_2, t_2. Формула (4.11) выражает тот факт, что волновая функция является той величиной, квадрат которой представляет собой вероятность обнаружения частицы в данной точке, и эта величина в случае, если частица первоначально находилась в точке 1, в точности равна величине K (в этом случае мы просто получаем справа действие дельта-функции на волновую функцию, что непосредственно дает требуемое). Формула (4.10) формализует правило вычисления величины K, данное нами выше.

Резюмируя все вышесказанное, мы можем определить все три пункта шага эволюции волнового роя. Вычисление волновой функции в данной точке есть суммирование амплитуд всех экземпляров роя, попавших в некоторый куб с центром в данной точке. Переопределение экземпляров волнового роя сводится к тому, чтобы разбить значение волновой функции в данном кубике на много одинаковых частей, то есть представить в виде $n\alpha$, где натуральное n велико, и создать n новых экземпляров, при этом приписав каждому из этих экземпляров случайную скорость из равномерного распределения в некотором большом кубе. Наконец, свободный полет экземпляров осуществляется по закону Галилея, причем амплитуда каждого экземпляра

при этом полете умножается на $e^{-\frac{i\Delta S}{h}}$, где ΔS есть действие этого экземпляра вдоль прямолинейной траектории при фиксированном времени δt его полета. Из соображений упрощения вычислений можно считать, что α для всех точек одинаково, а $n = n(x)$ пропорционально $|\Psi(x)|$ в данной точке x.

Убедимся, что формализм интегралов по путям эквивалентен стандартному. Для этого, следуя [19], найдем значение волновой функции, определенной согласно (4.11), в следующий по времени момент. Нам надо както явно представить ядро K. Мы предположим, что для малых значений промежутка времени ϵ существует только один путь вида $1 \to 2$, так что интеграция в (4.10) сводится только к одному слагаемому. Этот прием нуждается в обоснованиях с точки зрения стандартной математики, в конструктивной же он совершенно законен, так как если мы ограничим зерно пространственного разрешения некоторым пределом, все пути станут ломаными с конечными звеньями, являющимися отрезками прямых, и мы получим то, что мы хотим. Аналогично, можно считать, что действие равно произведению ϵ на лагранжиан, взятый в некоторой промежуточной точке. Тогда мы имеем

$$\Psi(x, t+\epsilon) = \frac{1}{A}\int\limits_R \exp\left(\frac{i\epsilon}{h} L\left(\frac{x-y}{\epsilon}, \frac{x+y}{2}\right)\right)\Psi(y,t)dy. \tag{4.12}$$

Подставим сюда $L = mx_t^2/2 - V(x,t)$ и $y = x + \delta$, что дает

$$\Psi(x, t+\epsilon) = \int\limits_R \frac{1}{A}\exp\left(\frac{im\delta^2}{2h\epsilon}\right)\exp\left(-\frac{i\epsilon}{h}V(x+\delta/2, t)\right)\Psi(x+\delta, t)d\delta. \tag{4.13}$$

Мы видим, что наибольший вклад получается при δ порядка $\sqrt{\epsilon h/m}$. То есть если мы будем раскладывать Ψ по степеням ϵ, оставляя члены только первого порядка, то мы должны сохранять члены второго порядка по δ. Тогда с указанной точностью получаем

$$\Psi(x,t) + \epsilon\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \int\limits_R \frac{1}{A} e^{im\delta^2/2h\epsilon}\left[1 - \frac{i\epsilon}{h}V(x,t)\right]\left[\Psi(x,t) + \delta\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \frac{\delta^2}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right]d\delta, \tag{4.14}$$

откуда в нашем приближении, учитывая известное равенство

$$\int\limits_R e^{im\delta^2/2h\epsilon}d\delta = \left(\frac{2\pi i h\epsilon}{m}\right)^{1/2}, \tag{4.15}$$

имеем

$$A = \left(\frac{2\pi i h\epsilon}{m}\right)^{1/2}. \tag{4.16}$$

Теперь, применяя известный интеграл

$$\int_R \frac{1}{A} e^{im\delta^2/2h\epsilon}\delta^2 = \frac{ih\epsilon}{m}, \tag{4.17}$$

мы получаем

$$\Psi + \epsilon\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \psi - \frac{i\epsilon}{h}V\Psi - \frac{h\epsilon}{2im}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}, \tag{4.18}$$

откуда непосредственно вытекает уравнение Шредингера.

Метод интегралов по путям, таким образом, является версией стандартной квантовой механики. Его практическое применение предполагает достаточно виртуозные вычисления с интегралами и алгеброй, но он дает некий новый взгляд на квантовую теорию по сравнению с уравнением Шредингера, хотя и является совершенно эквивалентным подходом. Например, можно рассчитать ядро для частицы в различных полях (см. [19]); для свободной частицы оно будет иметь вид

$$K(x,t,0,0) = \left(\frac{2\pi i h t}{m}\right)^{-1/2} e^{imx^2/2ht} \tag{4.19}$$

из чего можно сделать вывод о движении частиц (экземпляров частицы), находящихся в точке с координатой x со скоростью $v = x/t$, что в точности соответствует классической картине разлета экземпляров при «взрыве» первоначально находившейся в начале координат частицы.

С помощью траекторного метода можно также получить соотношение неопределенности координата–импульс, если рассмотреть прохождение частицы через узкую щель шириной $2b$. Несколько громоздкие вычисления ядра для прошедшей через щель частицы (см. [19], стр. 63–64) показывают, что после прохождения через щель носитель волновой функции частицы получает уширение ht/mb, что означает приобретение этой частицей дополнительной неопределенности в импульсе, численно равной h/b, откуда мы получаем соотношение неопределенности Бора–Гейзенберга:

$$\delta p \delta x = 2h. \tag{4.20}$$

Итак, в формализме интегралов по путям понятие экземпляра играет вторичную роль, поскольку экземпляр реальной квантовой частицы сохраняет собственную историю только в течение промежутка времени δt. Главную роль здесь играет волновая функция, которая фактически и определяет,

сколько и каких экземпляров должно быть создано в каждом кубике пространства. Тем не менее, именно свободное движение экземпляров является тем шагом эволюции, который создает унитарую квантовую динамику. Вторичность понятия экземпляра волнового роя видна из того, что плотность экземпляров такого роя пропорциональна модулю волновой функции, а не ее квадрату. То есть плотность экземпляров в волновом рое не есть плотность вероятности обнаружить в данной точке реальную частицу. Именно с этим связана кратковременность истории каждого экземпляра роя, то есть отсутствие у экземпляров динамических характеристик; масса экземпляра (в этом подходе равная массе реальной частицы) входит только в эволюцию его амплитуды — через действие. Несмотря на эфемерность экземпляров волнового роя, их применение сразу многое дает. В частности, мы можем с помощью интегралов по траекториям сформулировать критерий для определения, какой механикой следует пользоваться для данной частицы — квантовой или классической.

Действительно, рассмотрим переход от точки 1 к точке 2 по двум траекториям: γ_{cl} — траектории, являющейся решением уравнения классической маханики для данной частицы, и γ_{noncl} — некоторой другой траектории. Не ограничивая общность, можно считать, что экземпляры сохраняют свою историю при путешествии от точки 1 к точке 2, то есть эти точки достаточно близки друг к другу. Сравним два вклада в волновую функцию: 1) вклад от амплитуд экземпляров, двигавшихся по путям, близким к γ_{cl}, и 2) вклад экземпляров, двигавшихся по путям, близким к γ_{noncl}. Обозначим их через K_{cl} и K_{noncl} соответственно. Пусть S_{cl} есть действие частицы вдоль классической траектории ее движения. Предположим, что

$$|S_{cl}| \gg h. \tag{4.21}$$

Мы можем считать, что изменение действия по порядку величины равно самому действию, если траектория имеет достаточно общую форму. Поскольку классическая траектрия γ_{cl} является решением уравнения $\dfrac{\delta S[\gamma]}{\delta\gamma} = 0$ (принцип наименьшего действия), то изменение фазы на всех траекториях, близких к γ_{cl}, будет небольшим. Изменение же фазы на траекториях, близких к γ_{noncl}, будет большим, в силу неравенства (4.21), так как здесь не выполняется равенство $\dfrac{\delta S[\gamma]}{\delta\gamma} = 0$. Это значит, что вклад K_{cl} по абсолютной величине будет намного превышать вклад K_{noncl}, из-за того, что в первом вкладе складываться будут величины с примерно равными фазами, тогда как во втором — с разными. Мы получаем, что вся амплитуда сосредоточе-

на вдоль классического пути частицы, то есть она ведет себя как классическая частица. Если же (4.21) не выполняется, ситуация изменится, и вклад K_{noncl} сможет конкурировать с K_{cl}, то есть реальная частица уже не будет двигаться только по классической траектории и будет проявлять квантовые свойства (например, интерферировать при проходе через щели и т. п.) Таким образом, можно считать, что неравенство (4.21) является критерием применимости классической механики. Отметим, что малость действия может достигаться за счет малого веса частицы, малой скорости или малого времени. Даже массивные частицы, двигающиеся медленно или рассмотренные в течение очень короткого времени, проявляют квантовые свойства. При практическом описании промежуток времени δt выбирается с тем расчетом, чтобы получилась содержательная общая картина (а не только картина динамики изолированной частицы). Поэтому, например, электроны, как правило, задаются не в виде точечных объектов, а в виде волновой функции, тогда как ядра рассматриваются классически. Это описание называют моделью Борна–Оппенгеймера. Оно удобно для таких задач, как атомная физика, где предметом является состояние многих электронов, или молекулярная динамика, где исследуются растяжения и вращения молекул. Однако это представление совершенно не приспособлено, например, к описанию химических реакций, где принципиальную роль играет как раз квантовый характер движения ядер. Вообще, в течение одной и той же реакции, как правило, возникает необходимость как классического, так и квантового рассмотрения реагентов, и модель Борна–Оппенгеймера принимается, в основном, из-за ее простоты, основанной на большой (2 000 раз) разнице масс электрона и самого легкого атомного ядра-протона.

Интегралы по путям являются важным приемом, показывающим необходимость эвристики роя экземпляров мы будем использовать и развивать эту эвристику дальше.

4.3. Формализм многочастичной нерелятивистской квантовой теории

Целью квантовой теории является, в конечном счете, объяснение наблюдаемой динамики сложных систем, вообще говоря, имеющих макроскопические размеры. Путь к этому лежит через теорию атомов и молекул, поскольку их поведение (как нам представляется) должно иметь более простое объяснение. Надо прямо сказать, что мы фактически еще не имеем теории многочастичных систем, в которой вполне были бы учтены квантовые эффекты, и прежде всего — запутанность квантовых состояний многих

частиц, которые надежно детектируются в многочисленных экспериментах, как для фотонов, так и для массивных частиц типа достаточно сложных молекул. Мы надеемся продвинуться в этом направлении с помощью аппарата конструктивной физики.

Квантовый формализм для многих частиц основан на простом алгебраическом рассуждении, которое состоит в том, что если для описания одночастицной системы мы применяем волновую функцию от одного аргумента (координаты частицы и времени), то для описания системы n частиц мы должны применять волновую функцию от n переменных — координат этих частиц и (общего для всех) времени:

$$\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_n, t). \tag{4.22}$$

Общность времени является следствием нерелятивистского подхода, при котором есть абсолютное время, что дает возможность рассматривать эволюцию системы, подставляя в волновую функцию последовательные значения параметра времени $t = t_0, t_1, t_2, \ldots$.

При этом подразумевается, что координата x_j, являющаяся просто конкретной точкой конфигурационного пространства (например, для частицы в трехмерном пространстве без спина $x_j \in R^3$), в которой находится частица j. Таким образом, мы подразумеваем уже самой этой записью волновой функции возможность различения частиц, например, по их размещению в пространстве.

Алгебраическое представление (4.22) состояния системы n частиц компактно и красиво для его формальной записи. С его помощью можно очень просто доказывать разные хорошие и красивые свойства операторов, и вытекающие из них свойства решений уравнений, которым удовлетворяет такая функция.[5]

Но алгебраическое представление (4.22) также таит в себе и серьезнейший недостаток. Этот дефект имеет разные проявления, например, он не позволяет вести вычисления таких функций для хоть сколько-нибудь значительных систем, например, из 10 частиц. Этот сложностной барьер принципиален, и мы еще вернемся к его обсуждению. Но еще более явный дефект алгебраического представления состояния (4.22) заключается в том, что оно не дает нам возможности применять в квантовой физике естественную эвристику, о которой я говорил в предыдущем параграфе и без которой мы не сможем проникнуть в многочастичный квантовый мир.

[5]Например, если функция (4.22) обладает при $t = 0$ свойством антисимметричности или симметричности по координатам частиц и является к тому же решением уравнения Шредингера, то и в любой другой момент времени $t > 0$ она также будет удовлетворять тем же самым условиям симметричности или антисимметричности.

Эвристика, соответствующая функции (4.22), может состоять только в том, что отдельные экземпляры роев, соответствующих частицам $1, 2, \ldots, n$, объединяются в кортеж, и волновая функция как раз и определяет распределение таких кортежей. Назначение эвристики состоит в нахождении идей для построении эффективных алгоритмов моделирования. В данном случае ее назначение в том, чтобы достигнуть радикального метода экономии вычислительных ресурсов, нужных для работы с объектами типа (4.22). Это означает, что мы должны каким-то образом мотивировать, почему тот или иной экземпляр включается в этот, а не в иной кортеж. Такая эвристика не может быть сведена к одночастичному случаю, изученному нами выше. Эту эвристику я буду называть многочастичной. Она должна помочь прояснить происходящее в сложных системах, в том числе и возможности существования фундаментальных феноменов, связанных с такими системами и пока скрытых от нас. Этой эвристики в полном объеме у нас пока нет, но есть ее отдельные элементы, которыми мы будем заниматься в следующей главе. Стандартная же квантовая теория предлагает нам в многочастичном случае полагаться только на стандартный формализм объектов типа (4.22), который мы сейчас и изучим. При этом нам надо иметь в виду, что из-за полного отсутствия в стандартной квантовой теории какой бы то ни было многочастичной эвристики вообще, стандартный формализм становится гораздо более шатким основанием, по сравнению с одночастичным случаем, разобранным нами выше. Поэтому не следует думать, что многочастичная квантовая теория дает ответы на возникающие вопросы хотя бы в первом приближении так же надежно, как это было в случае одной частицы.

Квантовая теория удовлетворительно объясняет поведение одной частицы или небольшого числа частиц, если внешние условия такой системы являются стабильными и простыми. Эти методы немногих частиц были разработаны в первой половине XX века, и все многочастичные системы, которые рассматривались с тех пор с точки зрения квантовой теории, изучались исключительно с применением, по существу, одночастичных приемов. При этом отдельные частицы, входящие в гигантские ансамбли (например, газ из отдельных атомов или кристаллическая решетка), рассматривались как изолированные частицы, находящиеся под действием общего потенциала, создаваемого всеми другими частицами. Это, однако, является не квантовым, а полуклассическим путем. Типичным примером такого подхода является статистическая квантовая теория, использующая понятие квантовых состояний отдельных атомов при вычислении термодинамических характеристик газа. Другим примером служит квантовая теория твердых тел. Квантовая теория жидкостей тоже существует, но в ней несколько

больше открытых проблем. Еще менее детально разработанной является квантовая теория фазовых переходов или химических реакций. Таким же образом квантовая механика работает в области молекулярного моделирования. Например, при изучении конформации полипептидов она применяется для определения констант связи между отдельными аминокислотными звеньями, а дальше применяются исключительно классические методы. Наконец, для сложных систем вроде биомолекул или для динамических задач типа химических реакций квантовая теория вообще не применяется, если не считать расчета стационарных состояний и тривиальных утверждений о том, что в динамических процессах она работает, а как, мы пока точно не знаем, потому что все упирается в электродинамику, а это сразу вызывает большие вычислительные трудности.

Гильбертов формализм многочастичной квантовой теории фактически является развернутой программой исследования многочастичных систем, которую мы здесь и собираемся обсудить более детально, чем это делается в стандартных курсах по квантовой механике. В частности, мы обсудим проблему квантового компьютера, которая является, в сущности, сердцевиной этой программы. Мы также рассмотрим интерпретации экспериментальных данных в этой области, фундаментальное явление декогерентности и его модель в стандартном формализме. В заключение мы резюмируем те практические рецепты, которые дает этот путь для разработки теории многочастичных систем.

4.4. Унитарная динамика и измерения

Самой фундаментальной особенностью квантовой теории является двойственное описание динамики любого объекта, подразделяющейся на два совершенно особых типа: унитарная динамика и измерения. Эта особенность настолько фундаментальна, что, по-видимому, должна быть в той или иной форме сохранена для любого нового подхода к квантовой теории и даже для любой другой теории, которая может когда-либо в будущем прийти ей на смену.[6]

Рассмотрим эти два вида динамики отдельно.

Унитарная динамика. Считается, что возможные состояния $|\Psi\rangle$ квантовой системы образуют некое гильбертово пространство состояний $\mathcal{H}$, так что изменение любого состояния во времени при переходе от момента t_0

[6]Это в полной мере относится и к алгоритмике, где модель разделена на пользовательскую и административную части, хотя здесь нет прямого соответствия с унитарными эволюциями и измерениями.

к моменту t_1 задается унитарным оператором

$$U_{t_0,t_1} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}. \tag{4.23}$$

Можно еще детализировать это утверждение, сказав, что этот оператор имеет вид $U = \exp(-\frac{i}{\hbar}H(t_1 - t_0))$, где H называется гамильтонианом данной системы, и равен оператору ее полной энергии (зависящей от самой этой системы и от внешних потенциалов), что является просто переформулировкой того обстоятельства, что эволюция конкретного состояния $|\Psi(t)\rangle$ определяется уравнением Шредингера. Принципиальным в этой аксиоме квантовой теории является то, что если бы мы взяли вместо $|\Psi\rangle$ любое другое состояние $|\Psi_1\rangle$ в пространстве $\mathcal{H}$ и поставили бы его в те же самые условия, что и $|\Psi\rangle$, то мы бы получили результат применения того же самого оператора U_{t_0,t_1}.

Как это утверждение можно проверить? Для этого есть единственный путь: надо брать всевозможные состояния $|\Psi\rangle$ в качестве начальных состояний и подвергать их действию тех же самых потенциалов, чтобы посмотреть на результат их эволюции. После этого надо каким-то образом сравнить результаты их эволюций, то есть состояния вида $U_{t_0,t_1}|\Psi\rangle$, чтобы сделать вывод о том, насколько эта аксиома верна.

Но для этого совершенно необходимо сравнивать между собой квантовые состояния. Оказывается, этого нельзя сделать только с помощью унитарной эволюции. Для этого необходим совершенно другой вид эволюции квантовых систем, называемый измерением. Таким образом, даже само определение унитарности эволюции ровным счетом ничего не означает до тех пор, пока мы не применили к нашей системе измерение. Этот принципиальный факт говорит о том, что **не существует чисто квантовой механики, которая бы не опиралась на классическую механику, описывающую процесс измерения.**

Измерения. Зафиксируем некоторый базис $\{|\psi_1\rangle, \ldots, |\psi_n\rangle\}$ в пространстве $\mathcal{H}$, о котором будем считать, что он ортонормирован. Тогда измерением в этом базисе называется случайная величина, принимающая значения $|\psi_j\rangle$ с вероятностями $|\langle\psi_j|\Psi\rangle|^2$. Это и есть правило Борна вычисления квантовых вероятностей, которое в стандартном формализме принимается как аксиома. Нет никакого иного способа извлечь информацию о квантовом состоянии, кроме как подвергнуть его процедуре измерения. Единственный выбор при этом заключается в выборе базиса $|\psi_j\rangle$ — он зависит от экспериментальной установки, на которой проводится измерение. Чаще всего выбирают измерение каких-либо дополнительных величин, например, ко-

ординаты (и тогда говорят о координатном базисе в пространстве состояний) либо импульса (и тогда говорят об импульсном базисе в пространстве состояний). Измерить же одновременно и координату, и импульс невозможно в том смысле, что не существует ортонормированного базиса, объединяющего векторы из двух различных ортонормированных базисов одного пространства.

Физически измерение означает контакт изучаемой системы с некоторым классическим объектом, состоящим из множества частиц, так что унитарный характер квантовой динамики при таком процессе совершенно теряется и от него остаются только вероятности. Поскольку измерение есть единственная возможность что-то узнать про состояние квантовой системы, для того чтобы пользоваться квантовой теорией, абсолютно необходима классическая физика.

Из этих двух постулатов квантовой теории можно сделать очень серьезное заключение. Утверждение об унитарности квантовой эволюции касается не одной отдельно взятой эволюции, а огромного числа однотипных экспериментов, при которых только после статистической обработки их результатов будут видны такие свойства как линейность, сохранение норм векторов и т. д. При этом для обработки даже единичного эксперимента (одной эволюции) необходимо привлекать принципиально многочастичные системы, к которым мы уже не сможем применять квантовой механики, а будем вынуждены пользоваться механикой классической, чтобы определить, какой же исход измерения в действительности произошел: $|\psi_{j_1}\rangle$ или $|\psi_{j_2}\rangle$. Если мы по каким-либо причинам не можем обеспечить идентичности условий экспериментов (включая совпадающую настройку аппаратуры для разных экспериментов и вообще возможность пользоваться макроскопическими приборами для измерения), утверждения о квантовом характере эволюции теряют всякий смысл.[7]

Таким образом, квантовая теория для самого своего существования требует наличия многочастичных систем и возможности непосредственно вовлекать их в эксперимент. При этом мы должны одновременно иметь много частиц (макроскопический прибор) для измерения состояния, а также много частиц для выбора их в качестве измеряемой квантовой системы, чье состояние $|\Psi\rangle$ мы изучаем. Сколько времени займет процедура измерения? Если предположить, что частицы одного типа идентичны, можно произвести одновременно очень много экспериментов (как это и делается в статистической квантовой теории). Можно напрямую проверить аксиому об идентичности элементарных частиц, имеющих одинаковый тип. Для

[7] В главе 6 мы еще коснемся этой проблемы.

этого надо произвести множество последовательных экспериментов над одной и той же частицей. Современные приборы, такие как сканирующий туннельный микроскоп, позволяют адресоваться непосредственно к индивидуальным атомам, поэтому для постановки такого рода экспериментов нет принципиальных трудностей, кроме времени.

4.5. Многомировая картина квантовой теории

Гильбертов формализм является основой математического аппарата квантовой теории. Первым следствием этого формализма является принцип суперпозиции, то есть возможность совершать линейные операции над векторами состояний. Вторым важнейшим следствием этого формализма является метод рассмотрения многочастичных ансамблей, который называется многомировой картиной квантовой механики Эверетта. Многомировая картина квантовой механики[8] состоит в следующем. У всей Вселенной есть некоторая волновая функция

$$|\Psi_{global}\rangle. \tag{4.24}$$

Эта функция зависит от координат всех частиц во Вселенной и в точности определяет ее состояние. В дальнейшем, при изучении формализма КЭД, мы поймем, что $|\Psi_{global}\rangle$ должна также зависеть и от времен, которые, вообще говоря, могут быть различными для всех частиц. Однако если частицы взаимодействуют между собой, то время у них должно быть одно и то же. Мы покажем это ниже, а пока примем без доказательства. Тогда мы можем написать для волновой функции Вселенной представление вида

$$|\Psi_{global}\rangle = \sum_{_} \lambda_{_} |\bar{R}_{_}, t_{_}\rangle, \tag{4.25}$$

где через индекс $_$ обозначен так называемый «мир», то есть максимальный набор частиц, которые или взаимодействовали когда-либо в прошлом, или будут взаимодействовать когда-либо в будущем. Индекс мира принимает значения из некоторого множества $\mathcal{T}$. При этом у разных миров разное значение времени $t_{_}$, и потому миры «не пересекаются». Поэтому запись волновой функции Вселенной в виде (4.25) носит декоративный характер. В стандартном формализме, основанном на классической математике, миры не могут переходить друг в друга и вообще как-либо взаимодействовать

[8] Ее часто называют многомировой интерпретацией, хотя это не совсем точный термин. Многомировая картина является неотъемлемым свойством гильбертова формализма, и потому не может зависеть ни от какой интерпретации.

друг с другом, именно потому, что у них разное время t_- и, следовательно, не пересекающиеся базисные состояния.[9] История каждого мира — это результат группировки в (4.25) слагаемых с одинаковым значением времени t_-. Предположим, что мы приписываем параметру t_- физический смысл времени. Тогда важна структура множества $\mathcal{T}$. Если это линейно упорядоченное множество, то мы получаем детерминистическую картину, при которой в каждый момент имеется волновая функция Вселенной, и следующее состояние ее предопределено полностью. Такая картина лишает нас всякой возможности влиять на события, и потому находится за пределами любой разумной человеческой деятельности. Таким образом, нам надо считать, что $\mathcal{T}$ — множество с неполной упорядоченностью. Самое естественное — это множество с древовидной структурой. Именно так считается в стандартной квантовой теории. Тогда в некоторые моменты возможна «развилка» в эволюции Вселенной, так что один из «миров» эволюционирует по одному пути, а другой — по другому. Поскольку унитарная эволюция детерминистична на уровне волновых функций, мы должны сделать вывод о том, что развилка связана только с разными возможными результатами измерения одного и того же состояния. Если во Вселенной несколько «наблюдателей», то каждый из них, конечно, не может определить, его ли собственное поведение (инициация измерения) было причиной данной развилки, или поведение какого-либо другого «наблюдателя», и более того, он не может детектировать наличие других наблюдателей до того момента, как они обменяются информацией напрямую. То есть мы имеем возможность определить, что развилка имела место с большой вероятностью, собирая статистику многих состояний и выявив, что динамика по времени не является унитарной. На самом деле развилки происходят постоянно, составляя то явление, которое называется декогерентностью.

В результате измерения может произойти превращение вектора состояния Вселенной в различные новые векторы состояния — в каждый со своей вероятностью. Эти новые состояния и будут различными мирами. Поскольку измерение системы подразумевает контакт этой системы с какой-то большей системой, называемой измерительным устройством, то в канонической квантовой механике мы приходим к необходимости ввести в рассмотрение нечто большее, чем Вселенная. Например, это может быть некая невещественная сущность, вроде Сознания, и т. п. Если считать эту сущность тоже вещественной, то нам пришлось бы расширить Вселенную, включив в нее эту сущность, и все повторилось бы снова. То есть надо считать, что изме-

[9] В дальнейшем (см. главу 6) мы будем считать, что время одинаково, так что миры будут взаимодействовать по квантовому поведению отдельных частиц, как и полагается в нерелятивистской квантовой теории.

ритель носит не вещественный характер, а это означает, что он находится за пределами научного познания, и мы никогда не сможем распространить на окружающий нас мир научное знание. Можно было бы возразить, что Вселенная бесконечна и мы всегда можем представить себе, что есть некая часть, находящаяся за пределами нашего восприятия, и т. д. Этот ход не ведет ни к каким формальным противоречиям, но содержит богатые возможности для сомнительных манипуляций.[10]

Единственный разумный выход из этого положения состоит в том, чтобы условиться о главном:

- декогерентность есть свойство самой системы, а не ее контакта с окружением,
- эволюция вектора состояния в каждом мире должна описываться в точных терминах, то есть без привлечения невещественных сущностей,
- различные миры существуют только в административной части модели и служат исключительно целям отладки основного сценария, который мы и наблюдаем в эксперименте.

Случайные факторы, наблюдаемые нами, являются следствием работы административной части модели и не доступны для пользователей в силу конструкции этой модели. В конечном счете случайности должны факторизовываться, так чтобы окончательный результат от них не зависел. Приняв эти положения, мы можем продвигаться дальше, по пути физического конструктивизма.

4.6. Квантовый компьютер

В этом параграфе мы опишем фундаментальный прибор, существование которого прямо вытекает из рассмотрения многочастичного гильбертова формализма в рамках классической математики и который, в случае если такое рассмотрение адекватно описывает реальные квантовые системы, позволяет решать ряд вычислительных задач принципиально быстрее классического компьютера. Это устройство называется квантовым компьютером. Ограниченный квантовый компьютер (на нескольких кубитах) уже построен на различных технологиях.[11] Главный вопрос, связанный с КК, состоит в том, насколько КК можно масштабировать по памяти.

[10] Вроде парадокса самоубийцы, у которого всегда должна случиться осечка, так как он живет только в том мире, где она произошла, в других его просто нет, и т. д.

[11] Ядерно-магнитный резонанс, джозефсоновские переходы и ионы в ловушке.

Вопрос о физике квантовых компьютеров неизбежно приводит нас к необходимости изучения многочастичных квантовых явлений и, следовательно, к конструктивизации квантовой теории.

В этой главе дано краткое описание общей схемы квантового компьютера и квантовых вычислений. Ввиду важности теории квантового компьютера для нашей цели я даю в приложении более развернутое описание квантовых вычислений. О физических аспектах квантовых компьютеров можно прочесть в [51].

4.6.1. Идея квантового компьютера

Дадим сначала общую идею квантового компьютера. Представим себе, что нам нужно найти некое неизвестное натуральное число $|l_t\rangle$. Рассмотрим гильбертово пространство состояний квантовой системы с базисом $|0\rangle, |1\rangle, \ldots, |N-1\rangle$, так что l_t содержится среди чисел $0, 1, \ldots, N-1$. Приготовим квантовое состояние вида

$$|\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} |j\rangle, \tag{4.26}$$

в котором все амплитуды одинаковы. Вероятность найти неизвестное число, измеряя $|\tilde{0}\rangle$, равна $1/N$ что эквивалентно прямому перебору.

Теперь допустим, что исходя из той информации, которая у нас есть о неизвестном числе l_t, мы можем построить некоторую унитарную эволюцию U_t квантового состояния нашей системы $|\Psi(t)\rangle$, где $|\Psi(0)\rangle = |\tilde{0}\rangle$, так что $|\Psi(t)\rangle = U_t|\Psi(0)\rangle$. Например, это может быть эволюция под действием постоянного гамильтониана $H = \text{const}$, и тогда $U_t = \exp(-iHt/h)$, или гамильтониан будет зависеть от времени и тогда данную экспоненту надо понимать в смысле хронологической экспоненты. Выбор гамильтониана есть вопрос управления квантовым компьютером, и он осуществляется классической системой, например, лазерными импульсами или напряжением на электродах. Тогда эволюция квантового состояния нашей системы дает нам в каждый момент времени состояние

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j(t)|j\rangle,$$

где комплексные числа $\lambda_j(t)$ зависят от времени t. Если мы подвергнем это состояние измерению, мы получим искомое нами число l_t с вероятностью $|\lambda_{l_t}|^2$ согласно правилу Борна.

Предположим, что мы выбрали эволюцию нашей системы таким образом, что функция $|\lambda_{l_t}|^2$ принимает значение, близкое к 1, за время T_{qua} (см. рис. 4.1). Пусть T_{class} есть время нахождения неизвестного числа l_t на классическом компьютере. Если $T_{qua} < T_{class}$, мы говорим, что имеет место квантовое ускорение данного классического алгоритма поиска l_t. Действительно, если мы создадим устройство, реализующее данную эволюцию, и произведем измерение состояния нашей системы в момент времени T_{qua}, мы получим искомый результат l_t с большой вероятностью за время T_{qua}, то есть быстрее, чем если бы мы искали l_t на классическом компьютере.

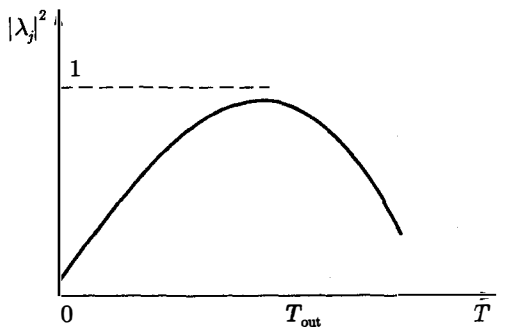


Рис. 4.1. Квантовое вычисление

Способ задания эволюции U_t называется управлением квантовым компьютером. Управление осуществляется классическим устройством, которое действует, вообще говоря, не зависимо от квантового состояния. В конце эволюции, которая еще называется вычислением на квантовом компьютере, происходит измерение заключительного квантового состояния, что и дает нам ответ с некоторой вероятностью, которая должна быть близка к 1. Очевидно, что всякий классический алгоритм может рассматриваться как квантовый, то есть вычислимые на классическом компьютере функции будут вычислимы и на квантовом компьютере. Верно и обратное: если функция вычислима на квантовом компьютере, то она будет вычислимой и на классическом. Действительно, мы, в принципе, можем моделировать любое квантовое вычисление классически, если у нас есть закон U_t: наличие такого закона означает возможность выписать унитарную матрицу, соответствующую этому оператору, а значит, и восстановить все состояния вида $|\Psi(t)\rangle$.[12] Таким образом, запас вычислимых функций для классического

[12]Такое моделирование — гипотетическое, так как необходимая классическая память будет расти как экспонента. Мы рассуждаем здесь с точки зрения классической математики, где на сложность внимания не обращают.

и квантового компьютера будет одним и тем же. Преимущество квантового компьютера состоит только в том, что он позволяет вычислять некоторые очень важные функции принципиально быстрее, чем любой классический, если только принять справедливость квантовой теории в ее стандартной форме в области многочастичных систем, что мы и будем делать в этой главе.

Для одной и той же задачи, которая состоит в вычислении некоторого набора чисел l_t, существует, вообще говоря, много квантовых алгоритмов решения, равно как и классических. Мы скажем, что данная задача допускает квантовое ускорение, если существует квантовый алгоритм, решающий ее быстрее, чем любой классический.

Оказывается, число задач, для которых возможно квантовое ускорение, очень мало (см. [30], [31]). Тем не менее, в число этих задач входят очень важные задачи переборного типа: прямой перебор и задача факторизации целых чисел. Для их рассмотрения нам нужна более детальная модель квантового компьютера.

4.6.2. Абстрактная модель квантового компьютера

Теперь мы опишем абстрактную модель квантового компьютера, которая может уже использоваться для подсчета его сложности, то есть времени T_{qua}.

Эта модель состоит из двух частей: классической и квантовой. Классическая часть состоит из регистров, в которых указаны номера элементарных унитраных операций из некоторого списка $U_1, U_2, \ldots$ простых 1-, 2- или 3-кубитовых унитарных операторов, и указателей, то есть стрелок, которые указывают, к каким кубитам надлежит применить данный оператор. Кроме этого, классическая часть содержит два особых регистра: регистр конца вычисления и регистр вопроса к оракулу.

Квантовая часть компьютера — это лента, в ячейках которой стоят кубиты. Потенциально лента не ограничена в том смысле, что к ней при необходимости можно всегда добавлять новые кубиты, инициализированные состоянием $|0\rangle$. Если лента содержит n кубив, то ее квантовые состояния заполняют 2^n-мерное гильбертово пространство состояний. Общий вид состояния квантовой части компьютера таков:

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j |j\rangle, \tag{4.27}$$

где $N = 2^n$, а коэффициенты λ_j — комплексные числа, называемые амплитудами соответствующих состояний $|j\rangle$. Таким образом, мы всегда мо-

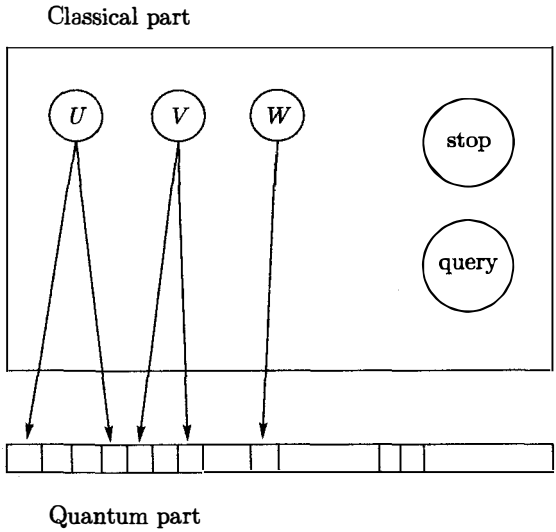


Рис. 4.2. Абстрактная модель квантового компьютера

жем считать, что эволюция состояния квантовой ленты происходит в конечномерном пространстве состояний, размерность которого N нам недоступна, хотя число кубитов n есть вполне доступная величина. Мы видим, что (4.27) совпадает с тем, что мы назвали кубитовым представлением волновой функции. Поэтому квантовый компьютер выражает стандартную форму многочастичного гильбертова формализма.

Квантовый алгоритм — это классический алгоритм, задающий изменение во времени состояния классической части компьютера. Вычисление на квантовом компьютере — это последовательность унитарных преобразований над состоянием квантовой части, которая задается состоянием классической части компьютера. То есть на каждом шаге j над состоянием $|\Psi_j\rangle$ выполняется преобразование вида

$$U \bigotimes V \bigotimes W \bigotimes \ldots, \tag{4.28}$$

где данные элементарные операторы $U, V, W \ldots$, коды которых стоят в регистрах классической части, выполняются над теми кубитами, на которые указывают стрелки, выходящие из соответствующего регистра.

Таким образом, чисто классический закон изменения управляющей классической части квантового компьютера индуцирует квантовую унитар-

ную эволюцию его квантовой части вида

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j(t)|j\rangle,$$

то есть сводится к изменению во времени амплитуд базисных квантовых состояний.

Мы дали определение вычисления без оракула, или абсолютного квантового вычисления. По аналогии с классическим случаем, можно ввести понятие квантового вычисления с оракулом. Предположим, что нам задан некоторый унитарный оператор $U: H_1 \to H_2$, где H_1 — m- и k-кубитовое гильбертово пространство состояний. Заведем на ленте определенное место — набор (регистр) из m кубитов, и специальный регистр в классической части, называемый регистром вопроса (query). Условимся, что если регистр вопроса содержит 0, вычисления происходят в обычном порядке. Если же регистр вопроса содержит 1, мы вместо обычного унитарного преобразования, индуцируемого классической частью компьютера, совершаем обращение к оракулу, которое заключается в том, что применяется оператор $I \bigotimes U$, где U применяется к выделенному нами m-кубитовому регистру, а идентичное преобразование — ко всем прочим. Нетрудно понять, что это определение является непосредственным распространением принципа вычисления с оракулом на квантовый случай.

Конкретизируем понятие квантового оракула на случай обычной функции вида

$$f: \{0,1\}^m \to \{0,1\}^k.$$

Заведем на квантовой ленте m- и k-кубитовые регистры, назвав первый регистром вопроса, а второй — регистром ответа. Пусть a и b — кортежи из нулей и единиц, содержащиеся в этих регистрах. Введем унитарное преобразование, определенное таким его действием на базисных векторах:

$$Qu_f|a,b\rangle \to |a, b \bigoplus f(a)\rangle, \tag{4.29}$$

где $\bigoplus$ означает побитовое сложение по модулю 2. Такой оператор является просто перестановкой базисных векторов, и потому он линейно продолжается до унитарного оператора во всем пространстве квантовых состояний. Он инволютивен, то есть $Qu_f^2 = I$. В приложении описано, как с помощью этого приема построить быстрый квантовый алгоритм перебора.

4.7. Роль запутанности

Как мы знаем, запутанное состояние двух квантовых систем S_1 и S_2 — это состояние, которое невозможно представить в виде $|\Psi_{S_1}\rangle \bigotimes |\Psi_{S_2}\rangle$. Это в точности соответствует, в обычной аналитической записи, невозможности представления волновой функции всей системы в виде произведения волновых функций ее частей S_1 и S_2. Можно ввести меру такой запутанности различными путями. Например, с использованием относительной матрицы плотности ρ_{S_1}. Определим меру запутанности как квантовую энтропию $H = tr(\rho_{S_1} \ln \rho_{S_1})$, которая равна тому же выражению, взятому для S_2. Такая мера запутанности часто применяется в теории квантовой информации.

Нетрудно понять, что квантовая эволюция любой системы, которая может быть представлена как эволюция незапутанного состояния (то есть тензорного произведения одночастичных состояний), может быть моделирована на классическом компьютере в режиме реального времени, то есть с сложностью, равной физическому времени. Из этого вытекает, что реализация быстрых квантовых алгоритмов на незапутанных состояниях невозможна, то есть квантовый компьютер построен как раз на запутанных состояниях, и без них он свелся бы просто к собственной классической части.

Но было бы ошибкой отождествить множество всех запутанных состояний с состояниями, имеющими максимальную энтропию запутанности H. Возможность получения многочастичных запутанных состояний даже с максимальной степенью запутанности совсем не означает, что мы создали квантовый компьютер. В качестве примера рассмотрим два класса запутанных квантовых состояний, которые реально детектируются в экспериментах на ионах в ловушке Пауля. Это состояния GHZ и W, имеющие вид

$$\begin{aligned} GHZ: &\quad \lambda_1|11\ldots1\rangle + \lambda_2|22\ldots2\rangle + \ldots + \lambda_k|kk\ldots k\rangle, \\ W: &\quad \lambda_1|100\ldots0\rangle + \lambda_2|010\ldots0\rangle + \ldots + \lambda_k|00\ldots1\rangle. \end{aligned} \tag{4.30}$$

Мы видим, что для хранения таких состояний в памяти компьютера достаточно выделить порядка n ячеек памяти, где n — число кубитов. Это означает, что любые вычисления с такими состояниями можно воспроизводить на классических компьютерах и, имея только такие квантовые состояния, невозможно реализовать быстрые квантовые алгоритмы (см. [3]).

Действительно, состояния типа GHZ и W можно свести к одночастичным состояниям. Рассмотрим сначала состояние GHZ. Его аналогом для $n = 2$ является так называемое шмидтовское состояние двух частиц, то

есть состояние двух частиц вида

$$\sum_j \lambda_j |\psi_j^1\rangle \bigotimes |\psi_j^2\rangle, \tag{4.31}$$

где $\{|\psi_j^1\}$ и $\{|\psi_j^2\}$ — ортонормированные базисы в пространствах состояний первой и второй частиц соответственно. Состояние (4.31) характеризуется N числами, где N есть размерность гильбертовых пространств состояний одной частицы. Таким образом, для хранения такого двухчастичного состояния необходим тот же объем памяти, что и для хранения состояния одной частицы.

Состояние GHZ есть форма шмидтовского состояния для нескольких частиц. Такое состояние означает следующее. У нас реально имеется только одна частица, но она состоит из нескольких частей, ведущих себя просто как одно целое. Рассмотрим состояние GHZ при $k = 2$: $|\Psi\rangle = |00\rangle + |11\rangle$. Будем трактовать 0 и 1 как положения одной частицы в двух различных фиксированных точках. Тогда измерение в стандартном базисе одной из частиц повлечет нахождение обеих частиц в одной и той же точке. Если же мы захотим измерить импульс частицы, нам придется применить к соответствующему кубиту квантовое преобразование Фурье, что в случае одного кубита есть, с точностью до условного поворота фазы, оператор Адамара. Применив к обоим кубитам такой оператор, мы перейдем в базис, в котором значениями кубитов будут импульсы соответствующей частицы. Простой подсчет показывает, что результат будет тот же: $|00\rangle + |11\rangle$. Это означает, что и импульс у обеих частиц будет одним и тем же при измерении его у любой из них. Это и объясняет то, что такое состояние есть состояние, по существу, одной частицы. Для детектирования такого состояния достаточно проверить интерференционные свойства объекта, состоящего из нескольких частей, например, интерференцию молекулы водорода на двух щелях. Наличие интерференционной картины и будет означать запутанность GHZ-типа. Таким образом, данный тип запутанности является достаточно широко распространенным. Более интересно детектирование такого типа запутанности на больших расстояниях. Для ионов в ловушках Пауля оно составляет несколько миллиметров, для фотонов — до нескольких километров.

Независимо от числа точек конфигурационного пространства (лишь бы оно было не меньше двух) справедливы следующие утверждения:

1) всякое квантовое состояние двух частиц можно представить в виде шмидтовского разложения;

2) существуют состояния трех частиц, которые нельзя представить в виде шмидтовского разложения.

Простейший пример, для случая 3 кубитов, дает состояние $|100\rangle + |010\rangle + |001\rangle$ или его аналог с разными амплитудами, что и является простейшим примером состояния типа W (и универсальным в смысле сводимости с применением одночастичных унитарных операторов, запутываний отдельных кубитов с анциллами и измерений, так называемой LOCC-сводимости).

Теперь обратимся к общему виду состояния W типа. Это состояние не может быть сведено к состоянию GHZ никакими LOCC-операциями. Однако его можно трактовать как одночастичное состояние, если рассматривать каждый кубит как элемент конфигурационного пространства. Напомним, что при кубитовом представлении волновой функции мы договаривались кодировать кубитами точки конфигурационного пространства в том смысле, что каждый следующий кубит был уточнением в два раза положения точки конфигурационного пространства. А теперь мы временно примем иное соглашение: каждый кубит будем отождествлять именно с точкой конфигурационного пространства, взятой с предельной возможной точностью. Это соглашение будет совершенно иным. Но тогда, скажем, базисное состояние $|100\rangle$ будет означать нахождение частицы в точке 1 (а точки 2 и 3 свободны), состояние $|010\rangle$ означает нахождение частицы в точке 2 (а точки 1 и 3 свободны), и т. д. Тогда состояние GHZ-типа вида (4.30) будет соответствовать волновой функции одной частицы вида $\sum_{j=1}^{k} \lambda_j |j\rangle$.

Запутанные состояния играют центральную роль в квантовой теории многих частиц. Например, без них невозможно дать описание химических реакций, о чем пойдет речь дальше.

4.8. Формализм квантовой электродинамики в кубитовой форме

Теперь мы готовы описать формализм квантовой электродинамики (КЭД). Причина, по которой это описание отложено, чисто техническая. Мы намереваемся описать формализм многочастичной квантовой электродинамики, а для этой цели стандартная форма представления волновых функций в виде $\Psi(r_1, r_2, \ldots)$ мало подходит. Причина этого состоит в том, что в КЭД удобно представлять главный оператор — эмиссию (абсорбцию) фотона заряженной частицей в импульсно-энергетическом базисе пространства состояний, тогда как для нас будет существенен вид такого оператора в пространственно-временном базисе, а переход между базисами гораздо удобнее представлять в кубитовой форме. Кроме того, нас будут интере-

совать произвольные векторы состояний многочастичных систем, которые могут быть, например, запутанными, так что эти состояния удобно изучать именно в кубитовой форме. И наконец, главный оператор КЭД удобнее всего представлять с использованием понятия анциллы, которое пришло из квантового компьютинга. Поэтому кубитовая форма для КЭД — наилучшая. Ее достоинство и в том, что дефект стандартного математического аппарата, применяемого в КЭД, становится совершенно очевидным.

КЭД представляет собой результат применения квантовой теории к электродинамике, то есть к взаимодействиям заряженных частиц и электромагнитного поля, описываемого в классической физике уравнениями Максвелла, а в квантовой — уравнением Дирака. Естественным путем для этого, было бы, на первый взгляд, оформление базовых состояний системы n частиц и k фотонов в виде $|x_1, x_2, \ldots, x_n, f_1, f_2, \ldots, f_k\rangle$, где x_j и f_i — координаты частицы j и фотона i соответственно. Но такой путь труден для КЭД из-за особенностей фотонов. Это частицы, движущиеся всегда со скоростью света и имеющие нулевую массу. Таким образом, с фотоном нельзя связать никакой системы отсчета, ибо система отсчета предполагает наличие ненулевой массы, покоящейся относительно центра отсчета. Более того, фотоны проявляются только во взаимодействиях с заряженными частицами и не взаимодействуют друг с другом непосредственно, то есть для них нельзя, вообще говоря, написать никакого аналога уравнения Шредингера с неким потенциалом. Потенциал сам создается фотонами. И наконец: фотоны появляются и исчезают не только при взаимодействии заряженных частиц с полем. Это может происходить также в вакууме, где фотон может породить электрон-позитронную пару. Поэтому в КЭД не применяется полного формализма гильбертовых пространств и нельзя говорить о ее законченности как физической теории, в том смысле, в каком законченной является обыкновенная квантовая механика.

КЭД состоит из описания фундаментальных процессов взаимодействия одной или двух заряженных частиц с фотонами и вычисления амплитуд этих реакций рассеяния, правил, по которым из этих амплитуд получаются классические уравнения Максвелла

Тем не менее, в этом разделе мы попытаемся описать формализм кубитового типа для квантовой электродинамики (КЭД) в его полном виде. Он имеет два принципиальных отличия от рассмотренного случая обычной квантовой механики. Во-первых, в пространство состояний КЭД будет явно входить время, во–вторых, это время будет свое для каждой частицы, и в-третьих, число частиц в системе не будет постоянным.

Пусть у нас имеется набор $\mathcal{X}$ пространственных состояний x и набор $\mathcal{T}$ моментов времени t для одной точечной частицы. Эти величины

будут принадлежать пользовательской части модели, то есть будут описывать фильм, действие которого разворачивается на данном множестве точек в пространстве для данного пользователя и кадры которого занумерованы данным набором моментов времени.

Гильбертово пространство состояний одной точечной частицы будет порождено базисными состояниями вида $|x,t\rangle$, где $x \in \mathcal{X}$, $t \in \mathcal{T}$. Общий вид состояния будет таким:

$$|\Psi\rangle = \sum_{x\in\mathcal{X},\ t\in\mathcal{T}} \lambda_{x,t}|x,t\rangle. \tag{4.32}$$

Таким образом, состояние системы не может зависеть от (пользовательского) времени: время входит в базис пространства состояний. Тем не менее, состояние системы зависит от административного времени τ, то есть мы можем рассмотреть последовательность состояний вида

$$|\Psi(\tau_1)\rangle, |\Psi(\tau_2)\rangle, \ldots, \tag{4.33}$$

где каждый переход $|\Psi(\tau_j)\rangle \to |\Psi(\tau_{j+1})\rangle$ будет называться реакцией рассеяния. Пользователь, изучающий процессы КЭД, будет смотреть фильм, посвященный одной-единственной реакции, внутри которой его пользовательским временем будет t, реально меняющееся не в бесконечных пределах, как в обычном аналитическом формализме, а в конечных пределах, хотя и столь больших, как это нужно пользователю. Однако другой пользователь, изучающий, скажем, химию, и которому КЭД нужна только для обоснования происходящих ассоциаций или диссоциаций молекул, будет смотреть уже другой фильм, который имеет вид (4.32), и для него пользовательским временем будет уже τ. Эти шкалы различаются порядками единиц.

Рассмотрим теперь систему из нескольких частиц, занумеруем их натуральными числами $1, 2, \ldots, n$ и условимся, что атрибуты частицы с номером j будут иметь верхний индекс j; вместо него мы будем также использовать черту: обычную, волнистую или двойную.

Пространство квантовых состояний системы из n частиц состоит из формальных линейных комбинаций с комплексными коэффициентами вида

$$|\Psi\rangle = \sum \bar{\lambda}|\bar{x}_1, \bar{t}_1, \bar{\epsilon}_1, \bar{x}_2, \bar{t}_2, \bar{\epsilon}_2, \ldots, \bar{x}_n, \bar{t}_n, \bar{\epsilon}_n\rangle, \tag{4.34}$$

где $\bar{\epsilon}_j$ есть вектор поляризации фотона j, состоящий из 4 компонент. Отметим отличие КЭД от обычной квантовой механики, проявляющееся в том, что в состояниях КЭД присутствуют слагаемые типа $|x_1, t_1, x_2, t_2\rangle$, то есть

мы можем говорить об одновременном рассмотрении разных частиц в разные моменты времени.

В сущности, состояние (4.34) можно рассматривать как сценарий, поскольку здесь содержится информация о состояниях рассматриваемой системы во всех возможных моментах времени.[13]

Напомним, что в КЭД $p = (\bar{p}, E)$ есть обобщенный импульс заряженной частицы, амплитуда фотонов есть 4-вектор ϵ_μ, такой, что векторный потенциал электромагнитного поля $A_\mu = \epsilon_\mu \exp(-iKx)$, где K — 4-вектор импульса фотона вида $(\bar{p}, \omega)$. Скалярное произведение 4-векторов определяется как

$$a_\mu b_\mu = a_4 b_4 - a_1 b_1 - a_2 b_2 - a_3 b_3,$$

то есть по повторяющимся индексам происходит молчаливое суммирование. Можно считать (см. [19]), что для детектируемого детектором (свободного) фотона $\epsilon_4 = 0$.

Главной операцией, определяющей эволюцию состояния (4.34), является оператор элементарного рассеяния, описывающий два процесса: рождение заряженной частицей нового фотона и поглощение ею имевшегося фотона. Эти процессы задаются в КЭД следующими двумя условиями:

1) они происходят только при сохранении энергии $\bar{E}_1$ и импульсов $\bar{p}_1$ системы, и

2) амплитуда первого пропорциональна $\lambda_{\bar{E}_1, \bar{E}_2, \bar{p}_1, \bar{p}_2} = i\ e\ (p_1 + p_2) \cdot \epsilon$, где ϵ есть вектор поляризации фотона, p_1, p_2 импульсы заряженной частицы до и после реакции, а амплитуда обратного процесса является комплексно-сопряженной к амплитуде прямого.

При этом мы считаем, что энергия и импульс сохраняются для каждого из рождений фотонов из частиц или их поглощений частицами, так что если $\bar{E}_1, \bar{p}_1$ — энергии и импульсы частиц до реакции, а $\bar{E}_2, \bar{p}_2$, $\bar{E}, \bar{q}$ — энергии и импульсы частиц и фотонов, соответственно, после реакции, то $\bar{E}_1 = \bar{E} + \bar{E}_2$, $\bar{p}_1 = \bar{q} + \bar{p}_2$.

Для перевода этих условий на язык кубитового формализма мы должны ввести одно соглашение о записи несуществующих фотонов: они должны иметь нулевую энергию и импульс, поляризация же их может быть произвольной. Итак, мы вводим в базисные элементы нашего пространства все фотоны: как реально существующие, так и еще не рожденные в ходе реакции, полагая, что энергия и импульс последних равны нулю. Реакция рассеяния должна иметь вид унитарного преобразования, матрицу которого

[13] Смысл компонент ϵ для нас не очень существенен; эти элементы служат только для получения уравнений Максвелла после перехода от волновых функций к средним значениям. О деталях этого перехода можно узнать по литературе, посвященной КЭД (см., например, [17]).

мы будем, следуя традиции КЭД, обозначать через S. Поскольку рассеяние задается в терминах энергий и импульсов, а не координат и времен, мы перейдем в базис импульсов и энергий и запишем S-матрицу в таком базисе. Переход от $(\bar{x}, \bar{t})$-представления матрицы к $(\bar{p}, \bar{E})$-представлению задается прямыми преобразованиями Фурье по каждой из координат $\bar{x}$ и обратным — по каждому из времен $\bar{t}$.

Оператор S, как и всякий унитарный оператор, можно представить в виде $S = \exp(iH_1\Delta t)$ для некоторого эрмитова оператора H_1. Мы будем считать, что рассеяние происходит на коротком отрезке физического времени Δt: $[t_0, t_0 + \Delta t]$, так что все времена t_j лежат в этом отрезке; иными словами, мы предполагаем, что если рассеяние произошло, то только один раз, поскольку при малом Δt вероятность более чем одного рассеяния будет очень малой. Это означает, что мы можем использовать приближенное равенство

$$S = \exp(iH_1\Delta t) \approx 1 + iH.$$

Мы опишем матрицу $H = H_1\Delta t$. В $(\bar{p}, \bar{E})$-представлении матрица H будет иметь следующий вид. В столбце, который соответствует состоянию с заряженными частицами с импульсами $\bar{p}_1$ и энергиями $\bar{E}_1$, на месте, соответствующем состоянию заряженных частиц, при котором они имеют импульсы $\bar{p}_2$ и энергии $\bar{E}_2$, а соответствующие им фотоны имеют импульсы $\bar{q}$ и энергии $\bar{E}$ при условии $\bar{p}_1 = \bar{p}_2 + \bar{q}$, $\bar{E}_1 = \bar{E}_2 + \bar{E}$, стоит число $\lambda_{\bar{E}_1, \bar{E}_2, \bar{p}_1, \bar{p}_2}$, элементы матрицы H, стоящие на местах, симметричных описанным относительно главной диагонали, равны результатам комплексного сопряжения описанным выше элементам, а на всех прочих местах стоят нули.

Рассмотрим результат применения оператора H к состоянию одной заряженной частицы. Пусть ее начальное состояние имеет вид (одинарной и двойной чертами обозначаем индексы суммирования):

$$|\Psi\rangle = \sum_{\bar{\bar{}}} \bar{\lambda}|\bar{x}_1, \bar{t}_1\rangle. \tag{4.35}$$

Теперь перейдем к импульсно-энергетическому базису и добавим анциллу, инициализированную состоянием $|\bar{0}\rangle$:

$$|\Psi\rangle \to A \sum_{\bar{\bar{}},=} \bar{\lambda} e^{-i(\bar{x}_1\bar{p}_1 - \bar{t}_1\bar{\bar{E}}_1)}|\bar{\bar{p}}_1, \bar{\bar{E}}_1\rangle|\bar{0}\rangle, \tag{4.36}$$

A — нормировочный коэффициент, равный $1/\sqrt{N}$, где N есть число всевозможных точек в координатно-временном (или импульсно-энергетическом) конфигурационном пространстве.

Эта анцилла изображает еще не возникший фотон, ассоциированный с данной заряженной частицей; этот фотон будет эмитирован ею на следующем шаге. Теперь применим оператор эмиссии фотона. Это даст состояние:

$$A \sum_{\substack{-,=,\tilde{-},\ \tilde{p}_1+\tilde{p}_2=\bar{\tilde{p}}_1,\\ \tilde{E}_1+\tilde{E}_2=\bar{\tilde{E}}_1}} \bar{\lambda}\tilde{\mu} e^{-i(\bar{x}_1\bar{\tilde{p}}_1-\bar{t}_1\bar{\tilde{E}}_1)}|\tilde{p}_1,\tilde{E}_1,\tilde{p}_2,\tilde{E}_2\rangle, \tag{4.37}$$

теперь нам надо снова вернуться к пространственно-временному базису:

$$A^2 \sum_{\substack{-,=,\tilde{-},\tilde{p}_1+\tilde{p}_2=\bar{\tilde{p}}_1,\\ \tilde{E}_1+\tilde{E}_2=\bar{\tilde{E}}_1,X_1,X_2,T_1,T_2}} \bar{\lambda}\tilde{\mu} e^{-i(\bar{x}_1\bar{\tilde{p}}_1-\bar{t}_1\bar{\tilde{E}}_1)} e^{i(X_1\tilde{p}_1+X_2\tilde{p}_2-T_1\tilde{E}_1-T_2\tilde{E}_2)}|X_1,X_2,T_1,T_2\rangle. \tag{4.38}$$

Подставим сюда $\tilde{p}_2=\bar{\tilde{p}}_1-\tilde{p}_1$, $\tilde{E}_2=\bar{\tilde{E}}_1-\tilde{E}_1$, а затем найдем коэффициент при фиксированном базисном состоянии $|X_1,X_2,T_1,T_2\rangle$. Он будет равен

$$A^2 \sum_{-,=,\tilde{-}} \bar{\lambda}\tilde{\mu} e^{-i(\bar{\tilde{p}}_1(\bar{x}_1-X_2))+i(\tilde{p}_1(X_2-X_1))+i(\bar{\tilde{E}}_1(\bar{t}_1-T_2)+\tilde{E}_1(T_2-T_1))}. \tag{4.39}$$

Это означает, что коэффициенты при базисных состояниях, у которых $\bar{x}_1$ сильно отличается от X_1, или X_1 от X_2, или $\bar{t}_1$ от T_2, или T_2 от T_1, близки к нулю. Таким образом, можно сделать вывод: при эмиссии фотона получается состояние, у которого во всех слагаемых время фотона и заряженной частицы одно и то же.

Рассмотрим базисное состояние в координатно-временном базисе $|x,t\rangle$, добавим к нему анциллу, инициализированную нулями, и применим к этому состоянию наш оператор H, а затем вернемся опять к координатно-временному базису:

$$\begin{aligned}
&|x,t\rangle \to A\sum_{p,E} e^{-ipx+iEt}|p,E\rangle \to\\
&\to A \sum_{\substack{p,E,\ p_1+q=p,\\ E_1+E_q=E}} e^{-ipx+iEt}(p_1+p)\cdot\epsilon|p_1,E_1,q,E_q,\epsilon\rangle \to\\
&\to A^2 \sum_{\substack{p,E,\ p_1+q=p,\\ E_1+E_q=E,x_1,x_q,t_1,t_q}} e^{-ipx+iEt}(p_1+p)\cdot\epsilon e^{ip_1x_1+iqx_q-iE_1t_1-iE_qt_q}|x,x_q,t_1,t_q,\epsilon\rangle =\\
&= A^2 \sum_{\substack{p,E,p_1+q=p,\\ E_1+E_q=E,x,\Delta x_1,t_1,\Delta t}} e^{-ipx+iEt}(p_1+p)\times\\
&\times\epsilon e^{ip_1x_1+iq(x_1+\Delta x)-iE_1t_1-iE_q(t_1+\Delta t)}|x_1,x_1+\Delta x,t_1,t_1+\Delta t,\epsilon\rangle =\\
&= A^2 \sum_{\substack{p,E,p_1+q=p,\\ E_1+E_q=E,x,\Delta x_1,t_1,\Delta t}} e^{-ip(x-x_1)+iq\Delta x}(p_1+p)\times\\
&\times\epsilon e^{-iE(t_1-t)-iE_q\Delta t}|x_1,x_1+\Delta x,t_1,t_1+\Delta t,\epsilon\rangle.
\end{aligned} \tag{4.40}$$

Теперь мы убеждаемся непосредственно, что коэффициенты при таких базисных состояниях, для которых выполняется одно из неравенств $x \neq x_1$, $t \neq t_1$, $\Delta t \neq 0$, $\Delta x \neq 0$, близки к нулю для любого вектора поляризации $\epsilon \in R^4$. Это вытекает из того, что такие коэффициенты равны линейным комбинациям дельта-функций Дирака δ_{x-x_1}, δ_{t-t_1}, $\delta_{\Delta t}$, $\delta_{\Delta x}$ и их производных. Близость к нулю вместо точного равенства возникает из-за дискретизации задачи при переходе к кубитовому представлению.

Из этого можно сделать главный вывод: фундаментальные взаимодействия КЭД носят локальный характер в том смысле, что происходят только в той точке пространства-времени, в которой находится исходная заряженная частица. Этот вывод не является тривиальным, поскольку в стандартном формализме волновых функций существуют унитарные операторы, для которых в конечной сумме содержались бы слагаемые с $x \neq x_1$ или $t \neq t_1$, или одно из Δt, Δx отлично от 0 и тогда взаимодействие не было бы локальным. Локальность взаимодействия значит, что в его результате мы имеем только такое состояние, при котором положение исходной заряженной частицы не меняется по сравнению с первоначальным: $x = x_1$, $t = t_1$ и фотон «находится» в той же точке. Если бы равенства нулю были строгие, мы бы вообще получили, что оператор H является тождественным. Здесь можно, конечно, постулировать, что фундаментальные взаимодействия КЭД нужно всегда записывать только в импульсно-энергетическом представлении, и тогда мы сможем написать закон образования матрицы H и работать с нею, оперируя реально не с ней самой, а с этим законом. Это соглашение будет допустимым и в рамках конструктивной физики, но только для одной заряженной частицы, взаимодействующей с созданным ею полем. Этот случай и рассматривается в КЭД (см. [17]). Здесь можно избежать расходимости рядов, вводя перенормировки зарядов и масс в зависимости от окружения, и тогда можно досчитывать малочастичные задачи до конца, получая, например, значение магнитного момента электрона или поправку к энергии стационарных состояний в атомах, возникающую из-за конечной скорости векторных фотонов.

Однако ситуация принципиально меняется, если мы хотим развивать КЭД в многочастичной области. Здесь возникает необходимость работать с состояниями, в которых у каждой частицы свое время: $|x_1, x_2, \ldots; t_1, t_2, \ldots\rangle$. Но это является преодолимым препятствием. Настоящая проблема возникает из-за того, что запись оператора H в КЭД оказывается зависимой от выбранной величины пространственно-временного разрешения. Мы видели, что представление оператора H в кубитовой форме не просто определяет его точность, как это имеет место для преобразования Фурье, а фактически задает его действие при выборе пространственно-

временного базиса в конфигурационном пространстве. Это делает вопрос о выборе базиса представления принципиальным для вычислений, что закрывает нам возможность использовать кубитовое представление для КЭД, а вместе с ним и возможность использования компьютеров при расчетах квантовых электродинамических систем. Положение не спасает и гипотетический масштабируемый квантовый компьютер, так как любое его применение к моделированию квантовой физики начинается с выбора дискретизации, то есть предполагает кубитовое представление волновых функций.[14]

4.8.1. Резюме стандартного формализма КЭД

Квантовая электродинамика является ядром всей квантовой теории. Именно она дает возможность приходить к численным результатам, что составляет критерий успеха для любой физической теории. Мы, однако, рассматриваем не физическую теорию целиком, а ее математический формализм, на предмет тех возможностей, которые он дает. Нас интересует возможность применения этого формализма к анализу динамики сложных, то есть многочастичных систем. Изучение таких систем в любом случае предполагает применение вычислительных машин, для чего необходимо представление КЭД в кубитовой форме. Подчеркнем, что это совершенно не зависит от того, какую степень масштабирования имеет квантовый компьютер: в любом случае необходимо кубитовое представление, то есть дискретизация.

Однако формализм волновых функций в КЭД, как мы видели, не допускает кубитовой реализации в полном объеме, так как основной оператор (эмиссия-абсорбция фотона заряженной частицей) может быть рассмотрен независимым от шага дискретизации образом только в импульсно-энергетическом представлении. Если же перейти к пространственно-временному базису в гильбертовом пространстве состояний, мы сразу получим зависимость основного оператора от нашего кубитового представления, то есть по существу — от выбранной величины пространственно-временного разрешения. Это и является главной проблемой формализма КЭД.

Еще одна особенность формализма КЭД состоит в том, что амплитуды процессов, содержащих больше одного фотона, например, изображенного на диаграмме, нельзя посчитать в рамках математического анализа — там получается расходящийся ряд (см. [17]). Иными словами, значение этой амплитуды (это один из элементов матрицы основного процесса) зависит

[14]Использование компьютера имеет смысл только тогда, когда с его помощью можно проследить весь объем ручного счета. Если вопрос о выборе базиса начинает зависеть от пользователя в каждый момент времени, то компьютеризация становится малореальной.

от величины зерна пространственного разрешения. Заметим, что необходимость досчитывать до числа ведет к изобретению частных приемов КЭД, вроде специально подобранных методов суммирования диаграмм в форме асимптотических рядов, а также изменению заряда и массы частицы в зависимости от ее окружения, называемой перенормировкой. Эти приемы, разумеется, нельзя считать частью математического формализма КЭД, о котором мы ведем речь. В формализме квантовой теории эти приемы не имеют никакого серьезного статуса. Тем не менее, именно в методе перенормировок и в принципах суммирования диаграмм Фейнмана заключена главная ценность КЭД, ибо эти приемы только и позволяют находить численные значения физических величин с поражающей воображение точностью![15] Все остальное является рутинным счетом, для которого можно применять стандартные компьютерные программы.

Такое положение является признаком серьезного изъяна математического формализма КЭД и всей квантовой теории. Отсутствие цельного формального аппарата для наиболее эффективной из физических теорий[16] является верным признаком пробелов в наших знаниях о микромире. Дальше мы увидим, что физический источник трудности — отсутствие точного представления запутанности в стандартном формализме. И если эту трудность можно, в какой-то степени, обойти для простых задач (например, посчитав лэмбовский сдвиг уровней энергии для атомов), то для более сложных задач, например, для задач описания химических реакций, она оказывается фатальной.

Итак, мы можем сделать главный вывод:

Проблема масштабирования КЭД лежит в области ее математического аппарата, и ее решение возможно только на путях модификации этого аппарата.

В дальнейшем мы увидим, что конструктивная математика предоставляет нам именно тот формальный аппарат, который необходим для этого.

4.8.2. Моделирование квантовых систем

Теперь обратимся к задаче квантового моделирования физических систем. Это как раз и есть та задача, которую имел в виду Р. Фейнман, выдвигая идею квантового компьютера.[17] Состояние многочастичной системы может быть описано набором чисел, выражающих значение физиче-

[15] Примером может служить нахождение магнитного момента электрона.

[16] По образцу КЭД строится теория ядерных сил и делаются попытки построить квантовую теорию гравитации.

[17] Выше мы уже видели универсальность состояний квантового компьютера в многочастичной области.

ских величин, таких как массы, координаты, скорости, время и т. д. Эти числа (в отличие от амплитуд) вещественные. Более того, при надлежащем ограничении области рассмотрения и разрешимости измеряющего прибора можно считать, что все они представляются в виде $\frac{l}{2^n}$, где n — разумной величины число. Тогда базисное состояние рассматриваемой многочастичной системы можно представить как базисный же вектор в пространстве состояний квантовой памяти из n кубитов. Соответственно, линейной комбинации базисных состояний изучаемой системы будет отвечать состояние квантового компьютера с точно такими же амплитудами. Кубиты нашего квантового компьютера для моделируемой системы носят виртуальный характер, т. е. мы не можем приписать им никакого естественного физического смысла. Однако в нашем квантовом компьютере, который будет моделировать изучаемую систему, это реальные, «физические» кубиты. Такой подход к описанию физических систем можно назвать «кубитовым». Мы увидим, что такой подход к описанию физики принципиально более эффективен, чем традиционный «битовый» подход, используемый при численном моделировании многочастичных процессов на классических компьютерах. Для этого попробуем решить на квантовом компьютере уравнение Шредингера. Здесь снова ключевую роль будет играть быстрое преобразование Фурье, но использоваться будет немного иное его свойство, чем раньше. Это свойство состоит в том, что преобразование Фурье переводит операцию дифференцирования в операцию умножения на независимую переменную с мнимым коэффициентом. Таким образом, если применить его к волновой функции, получится, что оператор двойного дифференцирования, входящий в гамильтониан, превратится для фурье-образа волновой функции в оператор умножения на квадрат независимой переменной этого фурье-образа с неким коэффициентом, а эта переменная есть не что иное, как импульс. Эта идея, хорошо известная физикам, вручную решающим волновое уравнение, великолепно работает и для квантового компьютера. Надо лишь убедиться, что квантовое преобразование Фурье обладает аналогичным свойством, связанным с операцией дифференцирования (для нашего квантового симулятора роль дифференцирования будет играть соответствующая конечная разность). Это следует из того, что QFT является приближением оператора настоящего преобразования Фурье при переходе к кубитовому представлению волновой функции. Возможность реализации на квантовом компьютере преобразования Фурье показана в приложении.

Нашей целью будет получение состояния квантового компьютера, соответствующего состоянию изучаемой системы в некоторый момент времени t. Нам нужно с помощью рабочих преобразований приблизить действие

оператора эволюции $e^{-iHt/h}$ на волновую функцию ψ_0, где $H = H_p + H_x$, $H_p = \dfrac{p^2}{2m}$, $H_x = V(x)$, $p = \dfrac{h}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}$ и потенциал $V(x)$ есть вещественная функция. Для простоты возьмем время t равным единице. Реализовать на квантовом компьютере действие H_x просто. Поскольку матрица этого оператора (а значит, и e^{iH_x}) диагональна, для этого надо всего лишь изменить фазы в зависимости от вида базисных состояний, — а это делается примерно так же, как инверсия нулевого состояния в алгоритме Гровера. Однако со вторым слагаемым гамильтониана это не пройдет. Трудность заключается в том, что оператор H_p не будет диагональным в выбранном нами «координатном» базисе. Однако мы уже знаем, как свести дело к простому диагональному случаю: надо перейти к импульсному базису, иными словами, совершить преобразование Фурье, — а это у нас очень хорошо получается. Для этого выберем маленький интервал времени Δt и представим приближенно наш эволюционный оператор через формулу Троттера:

$$e^{-iH} \approx \left(e^{-iH_x \Delta t}\, e^{-iH_p \Delta t}\right)^{1/\Delta t}. \tag{4.41}$$

В справедливости этой формулы легко убедиться, раскладывая экспоненту в ряд. Мы выбрали «координатный» базис, так что H_x имеет диагональный вид. Применяя квантовое преобразование Фурье QFT : $f \to$ $\to \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx} f(x)\, dx$ и его свойство переводить дифференцирование $\partial/\partial x$ в умножение на ip, мы можем представить действие импульсной части оператора как $e^{-iH_p} = \mathrm{FT}^{-1}\, e^{-ip^2 \Delta t/2m}\, \mathrm{FT}$, где средний оператор имеет диагональный вид. Теперь последовательные применения QFT и фазового сдвига на $-p^2/2m$ при реализации последовательности (4.41) дают требуемое приближение.

Примененное в данном методе преобразование Фурье осуществляется по каждой из координат отдельно, и если у нас несколько частиц — то по каждой из координат каждой частицы отдельно. Некоторую совершенно техническую проблему представляет реализация на квантовом компьютере унитарного оператора e^{-iH_x}, соответствующего потенциальной энергии. Если потенциальная энергия равна p, то реализация такого диагонального оператора может быть сделана, если мы просто совершаем последовательные повороты фазы вида $|0\rangle \to |0\rangle$, $|1\rangle \to e^{i\phi}|1\rangle$, в зависимости от места очередного кубита в регистре, содержащем значение координаты. В случае произвольного вида потенциальной энергии мы будем предполагать, что ее можно разложить в ряд Тейлора с коэффициентами, которые определяются

с помощью достаточно быстрого алгоритма. Например, если этот потенциал получается как сумма кулоновских потенциалов от n разных частиц, то такой алгоритм будет иметь линейную сложность в зависимости от числа n при условии, что координаты частиц также выдаются некоторым фиксированным алгоритмом (который можно рассматривать как оракул). Тогда оператор e^{-ihH_x} можно представить в виде схемы квантовых вентилей (quantum gate array) размера, линейно зависящего от n.

Сложность данного метода в зависимости от времени t реальной физической системы будет $O(t^2)$. Это непосредственно вытекает из того, что точность формулы Троттера имеет второй порядок, поскольку она следует из тейлоровского разложения экспоненты до первого члена. Можно понизить сложность до значения $O(t^{1+\epsilon})$ для любого $\epsilon > 0$, если вместо формулы Троттера использовать тейлоровское разложение более высоких порядков (см. [65]). Итак, на квантовом компьютере можно моделировать унитарные эволюции — решения уравнения Шредингера почти в реальном времени, и с памятью, пропорциональной размеру рассматриваемой системы,[18] в то время как на обычном компьютере это потребовало бы экспоненциальных ресурсов. Однако в квантовом компьютере мы получаем лишь квантовое состояние, являющееся кубитовым приближением реального, тогда как классическое вычисление дает нам значение амплитуд как таковых.

Заметим также, совершенно аналогично можно производить моделирование унитарной квантовой динамики системы движущихся заряженных частиц в нерелятивистском приближении, с учетом электромагнитного поля с векторным потенциалом A. Для этого надо заменить оператор импульса p любой частицы на $p - \frac{e}{c}A$, где e есть ее заряд, c — скорость света. Проследив вышеизложенные рассуждения, мы увидим, что это никак не отразится на конечном результате. Отметим, что это не является рассмотрением квантовой электродинамики, а лишь нерелятивистским приближением, для которого можно учесть эффекты поля, вводя указанную поправку в гимильтониан. То есть здесь мы считаем поле классическим, что по определению означает, что его можно включить в гамильтониан либо в виде потенциальной энергии или добавки к ней, либо в виде указанной добавки к импульсу. Вообще говоря, в системе многих частиц поле также является квантовым, то есть распадается на фотоны, и можно было бы говорить об истории каждого из фотонов. Доказательство возможности рассмотрения поля многих частиц как классического является важнейшим достижением многочастичного гильбертова формализма; мы приведем его здесь по книге [17].

[18]Предсказывать состояния системы в момент t за меньшее время $t' < t$ можно только в специальных случаях, см., например, [32].

Итак, предположим, что один электрон испускает фотон и этот фотон поглощается другим электроном (вместо электронов можно рассматривать атомы или атомные ионы). При испускании фотона испустивший его электрон испытывает отдачу (например, у него может поменяться спин). Это значит, что система, создающая поле (первый электрон), меняется и испускание следующего фотона будет уже в других условиях. Это и означает, что поле — квантовое, разные фотоны можно различить, так как состояние первого электрона у них будет разным. Тогда мы должны складывать вероятности испускания первого фотона, второго, и т. д., для получения вероятности испускания нескольких фотонов. Суммарная вероятность будет равна $n|\alpha|^2$, где α есть амплитуда испускания одного фотона (пусть, для простоты, она будет для всех случаев одна и та же), n — число фотонов. Мы тогда не сможем говорить о векторном потенциале A поля. Поле будет представлять собой отдельные фотоны. Их можно различить, измеряя состояние первого электрона, который их испустил.

Теперь рассмотрим другую ситуацию. Пусть у нас есть не один-единственный электрон или атом, а целый кусок материала. Тогда при излучении фотона одним из атомов полученная им отдача будет перераспределяться на весь этот кусок, и мы не сможем определить, какой из атомов изменил свое состояние! То есть в этом случае мы должны уже складывать не вероятности, а амплитуды, поскольку весь кусок ведет себя как единое целое (см. ниже, в части, посвященной сетям экземпляров). При сложении амплитуд их фазы будут близкими, из-за того, что мы не можем выделить атом, излучивший фотон (мы предполагаем, что регистрируется определенный фотон с заданным импульсом и поляризацией). При таком сложении мы получим амплитуду $n\alpha$ и, следовательно, вероятность $n^2|\alpha|^2$, что в n раз превосходит вероятность испускания фотона в случае различимых испусканий. Если фотоны нельзя различить, это и дает основания говорить о векторном потенциале, который получается как результат сложения волновых функций отдельных фотонов — сложение именно волновых функций, то есть амплитуд, а не вероятностей, как в первом случае. Поле, обладающее потенциалом, называется классическим полем. Мы видим, что поле будет классическим, если его создает множество частиц, находящихся в запутанном состоянии (кусок материала), то есть классическое поле создается испусканием фотонов большим ансамблем частиц, находящихся в запутанном квантовом состоянии. Именно эта запутанность частиц внутри источника поля и служит причиной того, что отдача от вылетевшего фотона перераспределяется между атомами источника. Это позволяет факторизовать состояние источника и состояние фотонов, когда общая волновая функция системы «источник+фотоны» будет иметь вид $|\Psi_{source}\rangle \bigotimes (|\psi^1_{photon}\rangle +$

$+|\psi^2_{photon}\rangle+\ldots+|\psi^n_{photon}\rangle)$. Тогда можно говорить о векторном потенциале поля, который равен $A=|\psi^1_{photon}\rangle+|\psi^2_{photon}\rangle+\ldots+|\psi^n_{photon}\rangle$.

Если же у нас есть только одна отдельная заряженная частица, например, электрон, мы не можем просто говорить о создаваемом им классическом векторном поле (о скалярном — можно, потому что составляющие его фотоны имеют нулевой импульс). Для отдельного электрона надо, вообще говоря, пользоваться квантовой электродинамикой, то есть рассматривать испускание отдельных фотонов, запутанные состояния этих фотонов и электрона (или атома), и только через это рассмотрение переходить к полю (см. главу 5). Например, при рассмотрении электрона в квантовой точке этот электрон будет находиться в запутанном состоянии с частицами, образующими точку, благодаря чему и возникнет то перераспределение отдачи от испущенного им фотона, которое обеспечивает классичность поля, созданного электроном.

Поэтому при рассмотрении квантовых вычислений на отдельных частицах (например, на отдельных электронах) надо обязательно заботиться о том, чтобы испускание фотонов удовлетворяло бы условию классичности поля, которое мы описали только что. Без этого нельзя считать, что у нас имеется векторное поле. В практическом смысле, для моделирования квантовых систем, это означает, что мы должны рассматривать как квантовые все входящие в модель частицы. Расширение системы тоже должно происходить присоединением частиц по одной. Если же мы введем граничные (внешние) условия, например, в виде некоего внешнего потенциала, мы должны гарантировать, что он создается огромным числом частиц, так что выполнено условие классичности поля.

4.8.3. Ансамбли идентичных фермионов и бозонов

Единственный случай, когда для системы многих тел возможно что-то конкретное предсказать с помощью волновой функции — это ансамбли идентичных частиц: фермионов или бозонов. Рассмотрим сначала случай двух одинаковых частиц. Тогда их совместное состояние должно описываться волновой функцией от двух переменных r_1 и r_2, которые являются координатами первой и второй частиц соответственно. Поскольку эти частицы идентичны и их нельзя различить, волновая функция при перемене r_1 на r_2 (и наоборот) должна проявлять симметрийные свойства. Поскольку для фермионов справделив принцип запрета Паули, принято считать, что для фермионов волновая функция должна быть антисимметричной:

$$\Psi_{fer}(r_1,r_2)=-\Psi_{fer}(r_2,r_1),$$

а для бозонов, где никаких запретов нет, она должна быть симметричной:

$$\Psi_{bos}(r_1, r_2) = \Psi_{bos}(r_2, r_1).$$

Предположим, что каждая из этих частиц, взятая в отдельности, может находиться в одном из двух состояний $\psi_1(r)$ или $\psi_2(r)$, так что они взаимно ортогональны. Какие симметричные и антисимметричные комбинации можно составить из этих двух функций? Таких комбинаций две. Во-первых, можно составить детерминант и перманент матрицы, построенной на этих функциях и координатах обеих частиц:

$$\begin{aligned}\Psi_{fer} &= \psi_1(r_1)\psi_2(r_2) - \psi_1(r_2)\psi_2(r_1),\\ \Psi_{bos} &= \psi_1(r_1)\psi_2(r_2) + \psi_1(r_2)\psi_2(r_1).\end{aligned}$$

Во-вторых, можно рассмотреть такие комбинации:

$$\begin{aligned}\Phi_{fer} &= \psi_1(r_1)\psi_2(r_1) - \psi_1(r_2)\psi_2(r_2),\\ \Phi_{bos} &= \psi_1(r_1)\psi_2(r_1) + \psi_1(r_2)\psi_2(r_2).\end{aligned}$$

Первый способ лучше второго тем, что там мы получаем формулы, масштабируемые на случай многих переменных. Это можно очень просто объяснить с помощью кубитового представления.

Мы представим одночастичные состояния ψ_1 и ψ_2 в кубитовой форме как $\psi_1 = \sum\limits_j \lambda_j^1 |j\rangle$, $\psi_2 = \sum\limits_j \lambda_j^2 |j\rangle$. Тогда детерминантное представление двухчастичного состояния имеет простую форму представления как $|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \bigotimes |\psi_2\rangle - |\psi_2\rangle \bigotimes |\psi_1\rangle$; при таком определении двухчастичной функции у нас получится $|\Psi\rangle = \sum\limits_{j_1, j_2} (\lambda_{j_1}^1 \lambda_{j_2}^2 - \lambda_{j_1}^2 \lambda_{j_2}^1) |j_{j_1}^1\rangle \bigotimes | j_{j_2}^2\rangle$, что в точности отвечает тому соответствию между функциональной и кубитовой записью квантовых состояний, которое мы определили ранее. Это рассмотрение полностью обобщается и на случай n идентичных фермионов, когда мы будем иметь детерминант матрицы. Аналогично можно рассмотреть и случай бозонов, который отличается только тем, что там будут перманенты вместо детерминантов.

Для второй формы образования двухчастичной волновой функции такого соответствия подобрать нельзя.

Разумеется, не любую антисимметричную функцию можно представить в виде детерминанта. Но ее всегда можно представить в виде ряда, составленного из таких детерминантов. Детерминанты описанного вида можно рассматривать, таким образом, как базис некоторого гильбертова пространства, которое называют пространством Фока чисел заполнения. Подробнее об этом написано в приложении.

Могло бы показаться, что свойство антисимметрии волновой функции является настоящей многочастичной запутанностью. Формально это так, поскольку Ψ действительно является запутанным квантовым состоянием. Однако эта запутанность носит особый характер, и мы поясним это на простом рассуждении. Предположим, что базисные состояния $|j\rangle$ являются ступенчатыми функциями с носителями, сосредоточенными на отрезках $[x_j, x_{j+1}]$ конфигурационного пространства. Рассмотрим два состояния $|\psi_1\rangle \bigotimes |\psi_2\rangle$, $|\psi_2\rangle \bigotimes |\psi_1\rangle$, которые образуют детерминант. Мы можем слегка изменить значение комплексных функций $\psi_1(r_1)$, $\psi_2(r_2)$ так, чтобы их носители стали бы непересекающимися множествами. Тогда детерминантное представление Ψ сведется просто к одному-единственному слагаемому и будет представлять незапутанное состояние. Таким образом, запутанность, обусловленная антисимметричностью волновой функции, является вырожденной. Она может быть заменена требованием о том, что носители волновых функций не должны пересекаться, что будет равноценным образом выражать принцип запрета Паули.

4.8.4. Спиновые и пространственные координаты

Главная особенность гильбертова формализма в области многих частиц состоит в экспоненциальном росте размерности пространства состояний. Это является основой проекта квантового компьютера. С другой стороны, такая особенность делает гильбертов формализм неудобным для исследования многочастичных систем. Это проявляется в том, что не удается построить хорошей модели декогерентности, то есть распада сложных квантовых состояний. Но есть и другие особенности гильбертова формализма, которые проявляются для задач с многими телами. Это особенности перехода от обычного представления волновых функций к их кубитовому представлению, и они проявляются при выборе пространства состояний как такового. Мы уже встречались с ними при рассмотрении запутанности в пространстве чисел заполнения в предыдущем параграфе. Здесь мы рассмотрим другой пример того же типа.

Этот пример относится к разделению конфигурационного пространства на спиновые и пространственные переменные. Согласно традиционному формализму, конфигурационное пространство одной частицы разделено на две непересекающиеся части: координатную и спиновую. Это означает, что состояние ансамбля частиц со спинами имеет вид

$$|\Psi\rangle = \sum_{j_c, j_s} \lambda_{j_c, j_s} |j_c\rangle \bigotimes |j_s\rangle, \tag{4.42}$$

где $|j_c\rangle$ и $|j_s\rangle$ — координатные и спиновые базисные векторы. Допустим, что в начальный момент спины и координаты были не запутанными:

$|\Psi\rangle_{ini}^{nonent} = |\Psi\rangle_{ini}^{c} \bigotimes |\Psi\rangle_{ini}^{s}$, где $|\Psi\rangle_{ini}^{c}$, $|\Psi\rangle_{ini}^{s}$ — координатная и спиновая волновые функции. Тогда применение оператора, действующего только на координаты частиц, оставит спиновое состояние без изменения.

Теперь рассмотрим такую практическую задачу. Пусть у нас имеется намагниченный кусок металла, и мы держим его в неподвижности относительно некоторой инерциальной системы отсчета. Начнем поворачивать его так, что он примет другое положение. Тогда направление магнитного поля, которое создается этим куском, изменится соответственно новому положению куска. Попробуем проанализировать этот простейший опыт с точки зрения гильбертова формализма. Будем считать, что этот формализм неограниченно масштабируется, то есть что его можно применять для произвольного числа частиц так, что все классические пределы будут сохраняться. Будем учитывать только координаты всех ядер и электронов, составляющих кусок, а также электронные спины (ядерных учитывать не будем). Тогда направление классического магнитного поля определяется состоянием спиновой волновой функции всех электронов. В намагниченном материале в очень грубом приближении можно считать, что спиновая и координатная части волновой функции не запутанны, то есть у нас есть квантовое состояние вида $|\Psi\rangle_{ini}^{nonent}$, в котором спиновая волновая функция $|\Psi\rangle_{ini}^{s}$ определяет направление классического магнитного поля, создаваемого этим куском.

Естественно считать, что механический поворот куска затрагивает только пространственные координаты всех ядер, и потому их спин остается неизменным. Таким образом, если квантовый формализм неограниченно масштабируется, то магнитное поле, создаваемое куском металла, должно сохраняться при повороте, что противоречит опыту. Итак, мы можем сделать вывод о том, что такой формализм не является неограниченно масштабируемым. Если бы мы рассматривали не кусок металла, а один единственный электрон, то его спин сохранялся бы при его движении внутри атома. Для одного электрона справедливо разделение пространственных и спиновых координат. Но для больших ансамблей это уже не так. Многочастичный гильбертов формализм не может, таким образом, масштабироваться на случай больших кусков материала.[19] Далее мы рассмотрим этот пример с позиций конструктивизма.

[19]Эта ситуация совершенно стандартная. Можно сказать, что гильбертов формализм здесь просто неприменим. Нас не может устроить такой ответ, так как мы занимаемся не стандартной физикой, а распространением квантовой теории на сложные системы. Наш главный инструмент – компьютер. Программа должна правильно обрабатывать все исключения. Там, где применение стандартной квантовой теории с неизбежностью опирается на традицию и интуицию, у нас должен работать алгоритм. Поэтому мы обязаны явно указывать, как именно действовать для всех случаев сразу, а не только для узкого круга традиционных задач.

4.9. Проблема декогерентности или почему необходим пересмотр оснований квантовой теории многочастичных систем

Вернемся к принципиальному вопросу об адекватности математического аппарата квантовой теории. Из предыдущего параграфа мы видим, что существует принципиальная разница между двумя типами эволюции квантовой системы — унитарной динамикой и измерениями. При этом процедура измерения не имеет описания в стандартном квантовом формализме, кроме постулата измерения Борна, содержащего правила подсчета вероятностей.

Таким образом, мы можем относиться к измерению двояко: мы можем трактовать его как своего рода силу трения, которая действует на рассматриваемую квантовую систему со стороны окружающей среды, или, напротив, считать, что выполнение измерений есть свойство самой квантовой системы. В первом случае мы имеем возможность устранить измерения вообще или производить их исключительно по своему усмотрению, так как силу трения можно, в принципе, устранить, например, помещая рассматриваемое устройство в глубокий вакуум. Во втором случае мы должны отказаться от стандартного формализма квантовой теории как от неадекватного, поскольку он не описывает некоторого фундаментального свойства квантовых систем.

Эксперименты, проводимые над квантовыми системами в надежде построить масштабируемый квантовый компьютер, свидетельствуют о том, что декогерентность вряд ли можно рассматривать как силу трения. Свидетельством этого являются запутанные квантовые состояния, полученные в экспериментах над ионами в ловушке Пауля. В таких экспериментах не удается получить масштабируемого квантового процессора, но удается генерировать сильно запутанные квантовые состояния типа W и GHZ. Это как раз те состояния, которые имеют хорошее алгоритмическое описание в рамках метода коллективного поведения (см. главу 5).

Проблема декогерентности есть проблема применимости квантовой теории к многочастичным системам, так как декогерентность есть фундаментальное свойство таких систем. В квантовой теории не существует никакого критерия для отличия между внешним потенциалом, входящим в гамильтониан рассматриваемой системы, и так называемым вредным воздействием на систему со стороны окружения, вызывающим декогерентность.

Область применимости квантовой теории, таким образом, строго ограничена задачами, которые сводятся к одночастичным. Примером являются задачи квантовой химии, такие как нахождение стационарных состояний

электрона в поле нескольких кулоновских центров (см. [64]). Задачи, где многочастичное поведение существенно, как, например, химические реакции, лежат за пределами применимости квантовой механики.[20] Надо подчеркнуть, что это ограничение принципиально и не может быть исправлено добавлением к квантовой теории неких новых разделов. Препятствием к распространению этой теории на многочастичные задачи является не ее мнимая незаконченность — она в действительности закончена. Главным и, по существу, единственным препятствием является ее математический аппарат. Применение стандартного анализа является конструктивным только в его вычислительной части, то есть когда мы пользуемся техникой интегрирования и дифференцирования и решаем дифференциальные уравнения. Однако содержащаяся в стандартном анализе идеология актуальной бесконечности, и вытекающая из этой идеи практика неограниченных экстраполяций формул не адекватна реальной природе. В этом и состоит неустранимый дефект стандартной квантовой механики.

Декогерентность в действительности не является чем-то вроде трения. Она есть проявление неточности описания реальных квантовых систем с помощью стандартного математического формализма. Так называемая контринтуитивность квантовой механики является следствием этой неадекватности формализма. То, что с помощью этого несовершенного математического аппарата удается неплохо описывать простые системы, такие как состояние электрона в атоме водорода, надо считать редкой удачей. Несомненный успех квантовой теории в описании простых систем связан с мощью аналитической техники, но никоим образом не является заслугой идеологии стандартного анализа с его актуальными бесконечностями. Как только мы переходим к чуть более сложным системам, видимая простота квантовой теории превращается в непреодолимое препятствие к проведению каких-либо вычислений для систем, хоть чуть более сложных, чем молекула водорода.

Рассмотрим следующую модельную задачу, в которой численный ответ не может быть получен с помощью квантовой теории ни с каким приближением. Это задача о диссоциации молекулярного иона водорода. Он состоит из двух положительно заряженных протонов и одного электрона, находящегося в основном состоянии в поле двух кулоновских центров. Если r есть расстояние между ними, основное состояние будет зависеть от r. Потенциальная энергия системы двух протонов, если электрон считать связывающей их силой, имеет вид, показанный на рис. 4.1. Это значит, что основное

[20] Попытки создания полуэмпирических методов типа Ландау–Зинера никак не меняют этого положения; критерием адекватности теории в конструктивизме является возможность построения видеофильмов всех процессов, относящихся к ее области применимости.

состояние электрона является связывающим для любого расстояния между протонами. Теперь предположим, что мы придали протонам начальную скорость, достаточную для вылета системы из потенциальной ямы. Задача заключается в том, чтобы определить, в какой момент электрон перейдет из основного состояния в поле двух протонов в какое-либо стационарное состояние в окрестности одного из них. Разумеется, здесь есть разные каналы: электрон может перейти в состояние непрерывного спектра, протоны тоже квантовые, и т. д. Но мы можем конкретизировать эту модельную задачу, предположив, например, что электрон переходит только в основное состояние относительно одного из протонов.

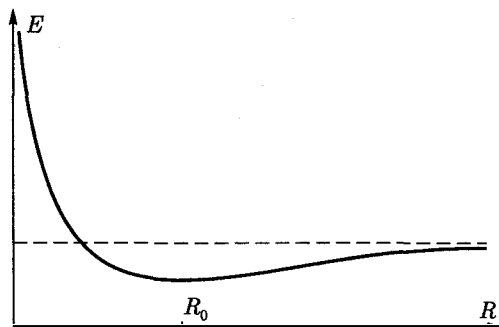


Рис. 4.3. Потенциальная энергия двух протонов в H_2^+

Эта задача есть задача о распаде основного состояния в двух потенциальных ямах, и она в принципе не может быть решена средствами квантовой механики. Причина этого не в том, что реальная ситуация требует квантовой электродинамики (в КЭД эта трудность многократно возрастет). Причина в том, что здесь мы имеем дело с коллапсом волновой функции, то есть, процедурой измерения. Эта процедура лежит вне квантовой физики, и с этим ничего нельзя поделать.

Основа копенгагенской квантовой теории — волновая функция многих частиц $\Psi(r_1, r_2, \ldots, r_n)$. Этот объект в формальном плане необычайно жесткий. Он прямо предусматривает использование римановской схемы интегрирования уравнения Шредингера, то есть обработки всего конфигурационного пространства для n частиц, что заведомо неприемлемо в теории сложных систем. Связь волновой функции с реальностью дает только борновское правило вычисления вероятностей, которое в многочастичном случае не может быть проверено непосредственно, так как амплитуда оказывается размазанной по неимоверно огромному числу состояний. Мы

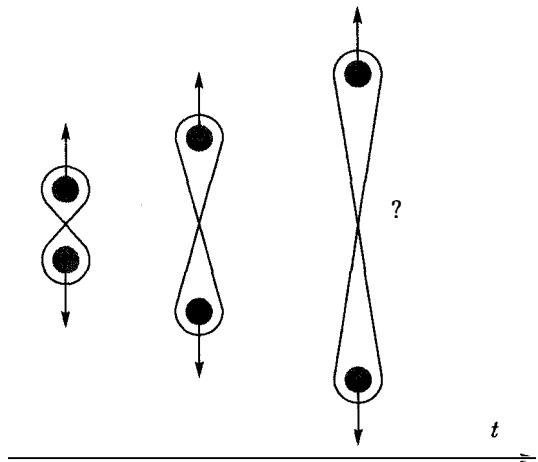


Рис. 4.4. Диссоциация молекулярного иона водорода

оказываемся перед необходимостью концентрации амплитуды на так называемых существенных состояниях, игнорируя все остальные, — только так получаются все немногочисленные результаты, касающиеся многих частиц в квантовой физике (например, рассуждение Фейнмана о классичности поля, создаваемого образцом материала). Но быстрые квантовые алгоритмы показывают невозможность обобщения такой схемы на сложные системы: даже ничтожно малые амплитуды, которые в стандартных экспериментах всегда игнорируются, в ходе конструктивной интерференции могут очень быстро создать наблюдаемые состояния, которых не должно было быть при учете только существенных состояний. В общем случае принцип концентрации амплитуды дается исключительно квантовым компьютингом, который оказывается заложником фундаментального свойства декогерентности. Волновая функция копенгагенской квантовой механики оказывается обьектом, верификация которого сомнительна. У нас нет ни одного надежного метода проверки существования волновой функции многих частиц, за исключением быстрых квантовых алгоритмов. Действительно, иначе для этого пришлось бы провести такое число экспериметов, каково общее число состояний в конфигурационном пространстве для n частиц, что уже при $n = 10$ не представляется возможным. На таком сомнительном объекте, как волновая функция, нельзя строить новую квантовую физику многих частиц. Волновая функция сослужила нам хорошую службу для малого числа частиц; с ее помощью были даже предсказаны так называемые запутанные состояния, которые явно вводятся в конструктивизме с помощью пред-

ставления о связях, и об этом речь пойдет дальше. Но как базовый объект в квантовой физике сложных систем Ψ-функция не годится.

Если бы все ограничивалось трудностью в получении точных оценок, дело было бы не так критично. Но формализм квантовой теории таков, что главные сценарии, определяющие поведение сложных систем (например, модели химических реакций) полностью зависят как раз от точности оценок. Мы, таким образом, оказываемся в тупике: для описания многочастичных систем, включая присущую им декогерентность, необходимо строить масштабируемый квантовый компьютер, а его постройка, в свою очередь, наталкивается на декогерентность как основное препятствие.

Это еще один довод в пользу пересмотра квантовой теории на основе конструктивизма. Сущность такой замены в том, что вместо стандартного математического анализа необходимо использовать конструктивный математический анализ. Именно конструктивные функции представляют адекватное описание физических процессов в многочастичных системах; в отличие от стандартного анализа здесь всегда требуется предъявить технику конкретных расчетов.

4.10. Резюме стандартной квантовой механики

«Я готов биться об заклад, что принцип суперпозиции будет стоять в веках.»

Р. Фейнман

В заключение мы должны рассмотреть вопрос о том, что будет сохранено в квантовой теории при неизбежной ревизии ее математического аппарата.

Краткий ответ заключается в том, что должны быть сохранены все ее результаты, подтвержденные в экспериментах. Это относится к одночастичным задачам, решение которых опирается, в сущности, на принцип суперпозиции, то есть на механизм интерференции амплитуд. Это не означает, что мы должны обязательно использовать для вычислений именно ту технику решений дифференциальных уравнений или суммирования диаграмм, которая входит в вычислительный арсенал квантовой теории. Напротив, там, где эта техника вызывает недопустимый перерасход вычислительных ресурсов, она должна быть заменена более экономичным приемом. Примером может служить описываемый в следующей главе метод коллективного поведения, заменяющий решение уравнения Шредингера, а также генетический метод построения квантовых сценариев для задач рассеяния.

При этом в любом случае применение новых вычислительных приемов должно давать те же асимптотические результаты, что и применение стандартных методов во всех тех случаях, когда стандартные методы применимы и дают конкретные результаты. Примером такой ситуации являются стационарные состояния нескольких электронов с учетом спинов в поле нескольких кулоновских центров. Противоположным примером, когда стандартные методы не дают конкретного результата, является квантовый компьютинг. Конструктивная физика не обязана моделировать работу масштабируемого квантового компьютера без декогерентности, так как это не в состоянии сделать стандартная квантовая теория. Проект квантового компьютера является именно проектом квантовой физики, реализуемость которого не подтверждена экспериментами, и потому конструктивная физика не даст нам решение проблемы факторизации по алгоритму Шора. Но конструктивная физика должна дать ответ на вопрос о том, что будет, если мы все-таки попытаемся реализовать практически квантовый компьютер, скажем, на ионах в ловушке Пауля. При этой реализации мы явно увидим, как именно влияние декогерентности погубит квантовое вычисление, так как декогерентность является встроенным свойством моделирующих алгоритмов, используемых в конструктивной физике.

Наконец, сохраненным должен быть так называемый многочастичный гильбертов формализм стандартной квантовой теории,[21] при котором строго разделяются квантовые «миры», состоящие из наборов экземпляров реальных квантовых частиц, составляющих рассматриваемую систему (см. следующую главу). Это связано с тем, что гильбертов формализм является полностью конструктивной методологией для рассмотрения систем многих частиц, применение которой совершенно не зависит от того, каким анализом мы пользуемся — традиционным или конструктивным. Эта методология неразрывно связана с применением тех вычислительных приемов типа дифференцирования и интегрирования, о которых говорилось выше, и которые просто не будут работать без гильбертова формализма.

Таким образом, полностью сохраняется та интрига квантовой теории, которая связана с ее многомировой интерпретацией и возможностью влияния этих «миров» друг на друга. Однако эта интрига разрешается, отчасти, описываемым ниже генетическим методом построения динамических сценариев и, отчасти, присутствием в наших моделях пользователя, наделенного правами эксперта. Это решение, в отличие от некоторых других подходов, вполне конструктивно. Однако оно не противоречит влиянию на эксперимент волевого усилия экспериментатора; просто такого рода усилия всегда должны трактоваться через включение в рассматриваемую систему частиц, связанных с самим экспериментатором. Потенциальная осуществимость такого включения всегда обеспечивается фундаментальным принципом конструктивной физики, требующим не более чем линейного роста вычислительных ресурсов для моделирования.

Сохранение гильбертова формализма опять-таки не означает использования при моделировании волновой функции для n частиц вида

$$|\Psi(r_1, r_2, \ldots, r_n)\rangle.$$

Использование такой функции, как мы уже видели, вызывает неприемлемый рост вычислительных ресурсов при моделировании. Поэтому вместо таких объектов должны будут использоваться более практичные методы, например, такие, как метод коллективного поведения многих частиц, связанный с их группировкой в кортежи (см. следующую главу) и использованием лебеговской схемы интеграции вместо римановской.

Резюмируя стандартную квантовую физику, мы скажем, что эта величайшая наука безусловно будет сохранена вся, за исключением той ее части, которая неотделима от абстракции потенциальной осуществимости

[21] Но мы при этом должны пожертвовать понятием волновой функции в случае многих частиц!

и не может быть конструктивизирована. Мне известно только одно такое построение в квантовой теории: масштабируемый квантовый компьютер. Этот проект не может быть перенесен в конструктивную физику и должен быть принесен в жертву планируемому преобразованию теории. Подчеркиваю, что речь идет именно о неограниченно масштабируемом квантовом компьютере в понимании копенгагенской квантовой физики. Ограниченные его варианты уже работают в реальности, и есть надежды на получение реальной отдачи от таких квантовых процессоров при моделировании, прежде всего, физических процессов (на эту тему см. работы [49–51]); мы вернемся к обсуждению этого вопроса в главе 6. Более того, эксперименты в области квантового компьютинга представляют собой необходимый экспериментальный фундамент обновленной квантовой физики, так как они способны прояснить принципиальный для нас вопрос о вычислительных ресурсах, требуемых для моделирования сложных систем из многих частиц. Мы коснемся этого вопроса в главе 5.

Глава 5

Алгоритмическая модификация квантовой теории

Мы видели, что конструктивная математика в большей мере апеллирует к опыту для проверки своих аксиом, чем математика классическая. Потому она и в большей мере зависит от физических экспериментов. Это проявляется, например, в том, что математический конструктивизм содержит концепцию множественности, или плюрализма. Истинностные оценки в конструктивизме менее детерминированы, чем в классической математике, — в этом мы имели возможность убедиться на примере моделей Крипке. Классическая математика содержит концепцию абсолютной истины; если мы выбираем аксиоматическую теорию и конкретную модель, то есть алгебраическую систему, то для любой формулы этой теории она будет либо истинной, либо ложной. В конструктивизме это не так. Хотя конструктивная математика и дает систему логического вывода, столь же надежную, как и классическая, но эта система содержит больше ограничений, чем система классического вывода. Ограничения конструктивизма вытекают из его процедурного характера, и принятие этих ограничений с необходимостью заставляет нас отказаться от того понимания «абсолютной истины», которое существует в классической математике и которое выражается теоремой Геделя о полноте исчисления предикатов. Попытка построить аналог теоремы Геделя для конструктивной логики приводит к моделям Крипке, то есть к тому плюрализму истинностных оценок, которые и являются родовой меткой конструктивизма.

В применении к физике это означает очень важную вещь. Конструктивная математика просто не может существовать без физической части. Привлечение физических экспериментов в конструктивизме необходимо для сохранения его целостности. Если классическая математика может существовать в так называемом «чистом» виде, то есть в виде, свободном от каких бы то ни было (в том числе и физических) приложений, то для конструктивной математики это невозможно. Она создана, по существу, только

для одной цели: служить физике в качестве формального аппарата теории. Поэтому алгоритмическая версия физических теорий и, прежде всего, самой продвинутой из них — квантовой механики — является неотъемлемой составной частью конструктивизма.

Конструктивизация квантовой теории требует совершенно конкретной эвристики для построения алгоритмов моделирования. В этой главе предлагается такая эвристика, основанная на понятии точечной частицы: эвристика коллективного поведения. Этот подход, строго говоря, не является единственно возможным при конструктивизации квантовой физики.[1] Достоинство эвристики точечных частиц в том, что она наглядна и потому применяется во всех других частях естествознания. В физике микромира реальные частицы ведут себя не так, как вели бы себя точечные частицы в классической механике, и поэтому широко распространилось ошибочное мнение о том, что эвристика частиц должна быть заменена волновыми функциями и операторами.[2] В действительности, если мы хотим двигаться вперед, нам совершенно необходимо иметь эвристику квантовой физики на языке частиц, а не волновых функций, потому что с волновыми функциями нельзя работать в многочастичной области.

Ключевым моментом эвристики частиц является представление о реальной частице как об ансамбле точечных частиц — ее экземпляров. В этом состоит идея метода коллективного поведения. Мы покажем, как с помощью этого метода можно пытаться воспроизводить выводы, сделанные в стандартном квантовом формализме. Замечу, что и здесь описываемый ниже подход не является единственно возможным. Например, если мы сохраним комплексные числа в основе формализма, можно было бы облегчить нашу задачу, воспользовавшись фейнмановской техникой интегралов по траекториям. Этот путь фактически уже описан нами в предыдущей главе. Он в точности соответствует стандартной квантовой теории. Его недостаток в том, что у частиц там нет истории, и потому эвристика оказывается ослабленной: возникают трудности при ее применении к многочастичным системам. Наличие у точечной частицы ее истории — элемент эвристики, важный для масштабирования.[3] Главный довод здесь в том, что конструктивизация квантовой теории может дать нам что-то новое, только если она будет радикальной.

---

[1]Например, можно представить себе, что кто-либо будет строить моделирующие алгоритмы на основе, скажем, волновых функций — для отдельных частиц, а некоего квазиклассического описания — для больших коллективов.

[2]Вместо бессмысленной полемики со сторонниками этой точки зрения я могу предложить им описать на языке волновых функций процесс репликации ДНК.

[3]Это также связано с допускаемой конструктивным формализмом возможностью существования генетической памяти у частиц, что обсуждается ниже.

Конструктивизация физики начинается с вопроса о алгоритмической формулировке квантовой механики. Мы принимаем без обсуждений, что правильное описание элементарных реакций между n частицами достаточно для построения актуальных моделей процессов любой степени сложности, включая описание простейших форм жизни, например, вирусов или бактерий; достаточно простая процедура обобщения процессов рассеяния многих частиц даст нам картину поведения очень сложных объектов.

Как мы убедились в предыдущей главе, гильбертов формализм квантовой теории нельзя моделировать в рамках эффективных классических алгоритмов. Тем не менее, впечатляющие успехи применения компьютеров в квантовой физике свидетельствует о безусловной перспективности моделирования реальных процессов. Это связано с явлением декогерентности, то есть произвольной порчи сложных квантовых состояний, что делает их более простыми и, тем самым, облегчает компьютерное моделирование.

Однако декогерентность, как мы видели выше, не входит в «библию» стандартной квантовой теории, и рассматривается исследователями как своего рода «трение», то есть посторонний фактор, искажающий идеальную картину. Конструктивная трактовка декогерентности принципиально иная.

Отклонение от унитарности квантовой эволюции с точки зрения алгоритмизма происходит из-за того, что классической памяти не хватает для размещения сложных квантовых состояний.

Это может выглядеть непривычно, но надо понимать, что мы придаем алгоритмам статус элемента нового математического аппарата квантовой теории, а описание любого физического явления, данное аппаратом, является исчерпывающим и не требует поиска еще более фундаментальных «механизмов».

Принцип соответствия, сформулированный Бором для соотношения квантовой и классической механики, будет иметь свой аналог и для новой ситуации, для соответствия между стандартной квантовой механикой и алгоритмической квантовой теорией. Этот принцип соответствия, переформулированный для нашего случая, примет такой вид. При алгоритмическом моделировании ресурсы вычислительной машины должны распределяться так, чтобы обеспечить наилучшее приближение к стандартному формализму гильбертовых пространств. Из этого вытекает, что при потенциально неограниченных вычислительных ресурсах алгоритмическое описание превращается в стандартный формализм гильбертовых пространств.

Этот принцип соответствия для алгоритмики содержит одну особенность: непонятно, какое приближение к стандартному формализму является

наилучшим. Вопрос о качестве приближения фактически решается пользователем модели с помощью экспертной оценки. Эта оценка в достаточно широком классе задач может быть в большой степени формализована, то есть сведена к выбору между ответами «да» и «нет». Это будет преимуществом алгоритмики перед стандартным подходом, где декогерентность вообще не имеет первопринципной модели, так как статус наблюдателя там не определен.

5.1. О физическом смысле алгебраических операций

Конструктивизация квантовой теории предусматривает переход от математического конструктивизма к практической работе по преобразованию квантовой теории. Мы последовательно приближаемся к этой цели, но должны посвятить еще некоторое внимание общим вопросам, без которых эффективная практическая работа невозможна. Мы уже видели порочность стандартного формализма, основанного на анализе, и у нас есть альтернатива: конструктивный анализ, основанный на алгоритмах и приближениях. Но этого мало. Нужна еще эвристика построения алгоритмов, без которой определение машин Тьюринга или общие теоремы будут бесполезными игрушками. У нас еще нет этой эвристики, и мы можем построить ее, только принимая во внимание уже существующую эвристику стандартной алгебры. Итак, нам предстоит более внимательно проанализировать смысл алгебраических операций, по сравнению с принятым в стандартной физике. Тот эвристический анализ, который мы проведем в этом разделе, поможет нам позже понять метод коллективного поведения. Читатель должен быть уже готов к тому, что алгебраическая техника отличается от той, которая нам будет нужна, потому что наша задача не в том, чтобы усовершенствовать эту технику, а в том, чтобы ее изменить в нужную нам сторону.

В чем состоит природа числа? Это количество однотипных объектов, называемых экземплярами, в некотором множестве M. Представим себе человека, не знакомого с арифметикой, но которому нужно научиться оперировать с такими количествами. Если объединить два множества, то у нас получится сумма чисел входящих в них экземпляров. Складывать количества можно по-разному. Например, можно перекладывать из мешка в мешок экземпляры по одному. А можно просто засыпать их сразу. Пока это не играет особой роли. Но вычитание встретится с определенной трудностью: нам может не хватить экземпляров. Здесь можно поступить так: завести некий запас таких экземпляров и добавлять их в то множество, где их не хватает, специально запоминая, куда и сколько экземпляров добавлено.

Но тут сразу же возникает серьезный вопрос о том, как мы будем записывать количества. Когда у нас не было вычитания, все было просто, мы хранили экземпляры (например, в мешках) и по мере необходимости их оттуда извлекали. Теперь мы должны кодировать количества. Самое простое здесь — ставить в ряд палочки: | обозначает один экземпляр, || — два экземпляра, ||| — три, и т. д. Если надо закодировать двенадцать экземпляров, мы должны рассматривать фигуру ||||||||||||. Тут можно догадаться, что это трудоемкий путь. Можно поступить проще: договориться представлять количество экземпляров, скажем, десять, как некий новый экземпляр, а затем представить это число как десять плюс два. Тогда при записи это будет короче: $I||$, где I обозначает этот самый новый экземпляр. Продолжая усовершенствования в том же духе, мы быстро придем к арифметической записи количеств, то есть к арабским числам. Как легко понять, выигрыш от такого перехода будет экспоненциальный, как по памяти, так и по времени. Теперь для сложения нам не надо перебирать все элементы в мешках. Достаточно применить правило сложения чисел в арифметической записи.

Как нам представить операцию умножения? Можно определить ее так, как это делается в теории алгоритмов, то есть с помощью примитивной рекурсии. Сначала поясним, что это такое, на примере сложения. Базисом будет $a + 0 = a$. Шаг рекурсии очень прост: $a + (x + 1) = (a + x) + 1$. Элементарная операция рекурсии есть прибавление единицы. Так как $a + x$ на данном шаге уже определено, мы можем определить $a + (x + 1)$ с помощью данной формулы.

Аналогично, уже имея сложение, мы можем определить и умножение. Рекурсия для него выглядит так. **Базис**. $a0 = 0$. **Шаг**. $a(x+1) = ax+a$. Как видим, все очень просто! Если освоить прием умножения в столбик чисел в арифметической записи, умножение потребует порядка $O(n^2)$ операций на машине Тьюринга, где n есть длина записи чисел. Если же вспомнить, что количество N экземпляров связано с длиной арифметической записи числа как $N = 10^n$, мы получим, что операции над количествами в арифметической записи дают экспоненциальный выигрыш по сравнению с манипуляциями с мешками.

Однако ничего бесплатного не бывает. За такую быстроту придется кое-чем заплатить. Здесь мы платим индивидуальностью экземпляров. Если в мешке находятся одинаковые монеты, этот способ подходит. Если там лежат, скажем, картофелины, которые немного различаются, арифметический способ также неплох, потому что мы можем считать, что все картофелины примерно одинаковы. Но разница становится принципиальной, например, если мы имеем дело с живыми существами, каждое из которых обладает своей индивидуальностью. Это и определяет ту границу, где алгебра-

ические приемы не могут быть эффективными. Тем не менее, фундаментальность физических законов означает, что они в равной мере относятся и к живому миру. Для нас это особенно актуально, поскольку наша цель — моделирование сложных систем. Поэтому мы обязаны проследить, каким образом можно производить алгебраические операции с такими деликатными объектами, которые не должны при этом терять своей индивидуальности. Разумеется, это также потребует от нас соответствующей платы.

Итак, мы уже видели, что сложение экземпляров в мешках не представляет особых проблем. Как быть с умножением? Можно действовать в соответствии с рекурсивным определением. Это означает, что мы извлекаем по очереди каждый экземпляр из первого мешка и производим для него такую процедуру: по очереди извлекая экземпляры из второго мешка, заводим для каждого из них один новый экземпляр, который берем из резерва, и в результате складываем все получившиеся количества. Так мы можем сохранить индивидуальную память о каждом из экземпляров, передавая ее на каждом шаге от уже имевшихся экземпляров к новым. Однако нетрудно понять, что строительство египетских пирамид будет более продуктивным путем, чем этот. Итак, рекурсивные методы, по которым в стандартной математике определяются алгебраические операции, служат исключительно для целей определения, но не могут применяться для практических вычислений.

Мы подошли к моменту, когда нам надо чем-то жертвовать. Если раньше у нас было полное соответствие количеств и чисел, то теперь придется нарушить строгость этого соответствия. В дальнейшем этот момент будет иметь и другие проявления, но мы зафиксируем это именно на примере умножения как основной алгебраической операции, без которой невозможно моделирование физики.

Как нам поступить для представления умножения? Можно условиться о том, что количество, которое получается при умножении двух реальных количеств, не является реальным, а представляет собой указание на некий виртуальный процесс. Пусть нам надо перемножить количества элементов в множествах A и B. Представим шаг этого виртуального процесса, как образование пар элементов вида a, b, где $a \in A$, $b \in B$. Всего таких способов комбинаций будет как раз $|A|\ |B|$. Но мы не будем явно перебирать их все, а ограничимся только взятием одного представителя из этого множества. Пока оставим в стороне способ выбора этого представителя, нам важно, чтобы он был только один, так как это даст нам гигантскую экономию по сравнению с методом египетских пирамид. Итак, зафиксируем некоторый способ спаривания экземпляров в двух множествах и образуем соответствующие пары a, b. Этим мы произвели умножение количеств.

Пойдем дальше и посмотрим, как можно было бы ввести понятие комплексного числа. Здесь нам придется заплатить еще больше, чем в случае умножения, так как операции над комплексными числами сложнее, чем простое умножение. Самый простой способ здесь состоит в привлечении простых физических понятий. Фаза комплексного числа связана с импульсом частицы простым правилом: волновая функция одномерной частицы с импульсом p имеет вид $\exp(ipx/\hbar)$. Таким образом, мы можем записать, что фаза волновой функции ϕ связана с импульсом соотношением

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{p}{\hbar}.$$

Таким образом, физический смысл фазы состоит в том, что скорость ее изменения в некотором направлении пропорциональна проекции импульса частицы на данное направление. Итак, смысл имеет не абсолютная фаза, а только относительная, и эта фаза меняется с той скоростью, с какой частица движется в данном направлении. Таким образом, надо как-то определять пространственное положение экземпляров. Это можно сделать только с точностью до общего сдвига, то есть можно определить только относительное пространственное положение. Учитывая то, что скорость экземпляров пропорциональна изменению фазы, мы можем поступить так. Изменить фазу на противоположную, что даст изменение скорости на противоположную, а затем рассмотреть столкновение экземпляров в воображаемом пространстве. Если считать, что такая процедура позволит определить положение экземпляров, то их плотность надо определять как $\bar{f}\ f$, где f есть комплексное число, которое сопоставлено одному экземпляру, черта означает комплексное сопряжение. Действительно, если мы сопоставим каждому экземпляру j некое число $f = p\ e^{i\phi_j}$ с одинаковым модулем p и индивидуальной фазой ϕ_j, то изменение скорости можно вызвать взятием комплексно-сопряженного числа. Таким образом, организация столкновений экземпляров вызывается изменением скорости на противоположную и объединением экземпляров в пары. Эта процедура может дать нам грубое определение положения экземпляров. Но тогда плотность экземпляров надо будет определять уже не как их число, а с помощью довольно своеобразной операции, выражаемой произведением чисел: $\bar{f}\ f$.

Есть и другой способ определения скоростей экземпляров. Можно рассмотреть ту точку воображаемого пространства, в которой экземпляр окажется через некий промежуток времени, и предположить, что там уже есть некоторый экземпляр. Тогда задание скорости означает снова фиксацию неких пар экземпляров a_1, a_2.

Итак, мы пришли к такому выводу. Умножение количеств возникает в связи с наличием у экземпляров скорости. Умножение представляется как

образование пар экземпляров. Умножение также определяет относительное пространственное расположение экземпляров. Эти выводы пока очень неопределенные, и они будут уточняться нами далее. Но именно они лежат в основе нужной нам эвристики коллективного поведения.

5.2. Кванты амплитуды и правило Борна

Многие уравнения математической физики, описывающие динамику классических систем (теплопроводности, колебаний, диффузии) появляются в результате перехода к пределу в задачах о динамике огромного количества малых тел, или квантов вещества. Соответственно, сфера применения таких уравнений ограничена конечностью размеров этих малых тел. Сами эти уравнения являются результатом действия более фундаментальных законов или механизмов взаимодействия малых тел (например, для уравнения колебаний это закон Гука). В КЭД такой механизм описывается диаграммами Фейнмана для фундаментальных процессов [17]. Диаграммы фундаментальных процессов помогают алгоритмизации КЭД, но не являются окончательной формой алгоритмизации, так как допускают операции со сколь угодно малыми или сколь угодно большими количествами. Алгоритмизация означает полный переход на операции только с конечными множествами.[4] Форму алгоритмизации дает описываемый ниже метод коллективного поведения. Сейчас мы рассмотрим один аспект этого метода — квантование амплитуд.

Дадим объяснение правила Борна, исходя из концепции кванта амплитуды (см. [29]).[5]

Рассмотрение квантовой эволюции с точки зрения многочастичного гильбертова формализма дает состояния вида

$$|\Psi\rangle = \sum_j \lambda_j |e_j\rangle, \tag{5.1}$$

[4]Заблуждение некоторых в том, что это ограничит возможности теории, широко распространено и имеет ту же природу, что и боязнь алгоритмов. Никто не может оперировать с бесконечными величинами, равно как и не алгоритмизируемыми процедурами. Вопрос только в том, что какие-то элементы алгоритмов могут быть нам просто не доступны (как административная часть в квантовой модели). Что же касается внутренней красоты, так у алгоритмов она не меньше, чем у их частного случая — формул. Но у алгоритмов есть одно принципиальное достоинство — возможность визуализации. Математика, в принципе не допускающая визуализацию, может опираться только на дедукционный подход, а это — шаткое основание (из-за теоремы Геделя о неполноте). Безоглядное использование такой математики подобно хождению по тонкому льду.

[5]Схожие рассуждения приведены в работе [47], но у нас борновское правило получается из общей алгоритмической концепции без дополнительных предположений.

где суммирование распространяется на бесконечное множество различных базисных состояний системы $|e_j\rangle$. Действуя в духе алгоритмического подхода, мы усечем этот ряд до конечной суммы, которая получится при отбрасывании всех слагаемых с коэффициентами λ_j, по модулю меньших некоторого заранее известного порогового значения ϵ. Такая сумма должна содержать не более $1/\epsilon^2$ слагаемых. Пусть N — число базисных состояний для одной частицы. Тогда мы можем считать, что $\epsilon = \frac{1}{\sqrt{N}}$. Таким образом, состояние будет иметь вид

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j |e_j\rangle, \tag{5.2}$$

где некоторые слагаемые могут быть нулевыми.

Назовем редукцией уничтожение в записи состояния всех слагаемых, амплитуды которых по модулю меньше ϵ. Эту константу будем называть квантом амплитуды. По умолчанию, мы будем производить редукцию любого состояния, которое будет получаться в нашей модели по описываемым ниже правилам. Будем называть такие состояния допустимыми.

Сейчас мы продемонстрируем, как процедура редукции, заключающаяся в отбрасывании малых амплитуд, приводит к борновскому правилу для вычисления квантовой вероятности. Наша цель — в том, чтобы свести вычисление вероятности получения определенного базисного состояния A при измерении квантового состояния Ψ к применению классического правила

$$p(A) = \frac{N_{suc}}{N_{tot}},$$

где N_{suc} — число благоприятных исходов (то есть тех элементарных исходов, при которых реализуется событие A), N_{tot} — общее число элементарных исходов. Нам нужно определить множество всех элементарных исходов и установить соответствие между элементарными исходами и базисными состояниями измеряемой системы. Назовем элементарными исходами те состояния расширенной системы (измеряемая система + измерительный прибор), амплитуда которых в данном квантовом состоянии равна по модулю кванту амплитуды ϵ. Множество элементарных исходов будет, таким образом, зависеть от квантового состояния расширенной системы.

Если обозначать через $|\Psi_j\rangle$ базисные состояния измеряемой системы, а через $|\Phi_j\rangle$ базисные состояния измерительного прибора (который может быть, например, глазом наблюдателя), мы получим при контакте этих двух

объектов состояние вида

$$\sum_j \lambda_j |\Psi_j\rangle \bigotimes |\Phi_j\rangle. \tag{5.3}$$

Теперь, поскольку измерительный прибор очень массивен по сравнению с измеряемым объектом, при попытке описать его квантовые состояния мы вынуждены будем разбить состояния из (5.3) на сумму l_j базисных состояний (надо учесть, например, состояния всех входящих в измерительный прибор ядер, электронов и т. д.). То есть даже если при самом контакте у нас и имелось состояние $|\Phi_j\rangle$, в результате эволюции вместо него очень быстро возникнет состояние вида $|\Phi'_j\rangle = \sum\limits_{k=1}^{l_j} \mu_{j,k}|\phi_{j,k}\rangle$, где со временем l_j будут очень быстро возрастать до тех пор, пока амплитуды по модулю не достигнут величины кванта амплитуды ϵ, после чего произойдет их обнуление. Следовательно, все модули амплитуд $\mu_{j,k}$ следует считать примерно одинаковыми. Если мы подставим выражение для $|\Phi'_j\rangle$ вместо $|\Phi_j\rangle$ в выражение (5.3), то амплитуды состояний $\phi_{j,k}$ будут равны $\dfrac{\lambda_j}{\sqrt{l_j}}$ в силу унитарности квантовой эволюции.

Мы обязаны производить процедуру редукции, которая заключается просто в отбрасывании состояний $\phi_{j,k}$ с малой по модулю амплитудой. Поскольку промежуток времени, в течение которого происходит описанное разбиение на огромное число слагаемых, — ничтожно мало, то при вычислениях это будет фактически означать, что мы разбиваем каждое слагаемое в (5.3) на l_j новых слагаемых так, чтобы все получившиеся амплитуды были близки к кванту амплитуды и приблизительно одинаковы, так как именно это делает все состояния равноправными перед проведением редукции и дает возможность применить классическую урновую схему. Но тогда количество l_j слагаемых с первым сомножителем $|\Psi_j\rangle$, что есть число благоприятных исходов, будет пропорционально $|\lambda_j|^2$, и если при редукции выживет только одно слагаемое, мы получим в точности правило Борна для квантовой вероятности.

Таким образом, вероятностное пространство зависит от выбора волновой функции $|\Psi\rangle$. Мы рассматриваем фактически условные вероятности получить при измерении тот или иной исход при условии, что система находится в состоянии $|\Psi\rangle$.

Приведенное объяснение борновского правила вычисления квантовой вероятности опирается только на наше определение редукции алгоритмического описания квантового состояния как отбрасывание малых амплитуд.

Такая редукция выполняется и на каждом шаге моделирования унитарной эволюции просто потому, что без этой процедуры моделирование вообще будет невозможным. В нашем подходе специфика измерения по сравнению с унитарной эволюцией только количественная: это тот момент, когда наша система вступает в контакт с массивным объектом, который можно назвать окружением, что дает разбивку слагаемых в (5.3) на большое число новых слагаемых. Кроме этого естественного предположения мы использовали только нормировку волновой функции, сохранение которой вытекает из уравнения Шредингера. Таким образом, при нашем объяснении борновского правила мы не пользовались ничем, что выходило бы за рамки обычных предположений квантовой механики, за исключением только нашего определения редукции как отбрасывания слишком малых амплитуд. Заметим, что именно такая процедура редукции превращает набор фейнмановских траекторий в классическую траекторию движения в случае массивного тела (см. [19]). Декогерентность мы трактуем как формирование запутанных состояний вида (5.3) с окружением, то есть не проводим никакого различия между ним и измерением рассматриваемой системы. Таким образом, закон Борна для квантовой вероятности и необратимая порча квантового состояния при декогерентности являются следствием зернистости амплитуд.

Наконец, заметим, что при выводе борновского правила мы использовали только запутанность состояний вида (5.3), которая относится к шмидтовскому типу, то есть является очевидным обобщением запутанности ЭПР типа.

То, что важнейшая аксиома, связывающая квантовую механику с обычной, — правило Борна, имеет такую простую трактовку в терминах квантов амплитуд, отнюдь не случайно. Ниже мы рассмотрим конкретизацию метода квантов амплитуд: метод коллективного поведения, который может позволить построить динамическую картину многочастичных квантовых эволюций на практике.

5.3. Абсолютная модель декогерентности

Алгоритмический подход предлагает следующую модель декогерентности:

Декогерентность есть отклонение реальной эволюции квантовой системы из n частиц от решения уравнения Шредингера, обусловленное нехваткой классической памяти для записи возникающих в таком решении состояний в гильбертовом пространстве H для n частиц.

Таким образом, декогерентность квантовых состояний не является чем-то типа трения, как в стандартной квантовой теории. Декогерент-

ность — это свойство, присущее квантовой динамике изначально. Оно является мерой отклонения этой динамики от унитарной эволюции, выражающееся самим алгоритмическим формализмом: требованием наличия эффективного классического алгоритма, определяющего эволюцию квантовой системы.

Эта алгоритмическая модель декогерентности слишком общая, чтобы мы могли применить ее хоть к сколь-нибудь конкретной ситуации. Мы уточним эту модель, взяв за основу конструктивный математический анализ. В нем любая функция $f(x)$ является конструктивной функцией конструктивной вещественной переменной. Это означает, что, говоря о функции, мы подразумеваем, что по любому приближению аргумента, зная только это приближение, мы можем эффективно построить приближение значения функции на этом аргументе. Если нам дадут более точное приближение аргумента, мы должны дать более точное приближение функции, и т. д. Но на каждом шаге мы знаем только данное приближение аргумента x и больше ничего. Если бы мы оборвали этот процесс постоянного уточнения значений на некотором шаге, мы должны были бы признать, что значение функции $f(x)$, вычисленное на этом шаге, и является абсолютно точным значением функции. Это наводит на мысль о том, что все процедуры построения функций и должны в действительности обрываться, только мы не знаем, на каком именно шаге. Понятие конструктивной функции и отражает меру нашего незнания действительных механизмов этого обрыва и того момента, когда он произойдет. Но если он происходит, то самое простое предположение состоит в том, что рассматриваемые величины x и $f(x)$ в действительности являются зернистыми, то есть принимают одно из значений $\epsilon, 2\epsilon, 3\epsilon, \ldots$, для очень малой величины ϵ, то есть квантуются.

В предыдущем параграфе мы видели, что простое допущение квантования амплитуды сразу дает нам правило Борна для квантовой вероятности. Это наблюдение позволяет выдвинуть следующую, более детальную модель декогерентности:

Декогерентность наступает в результате наличия минимального ненулевого значения модуля амплитуды ε любых квантовых состояний.

Такую модель декогерентности мы будем называть абсолютной. Смысл такого названия состоит в следующем. Физическая размерность амплитуды есть $1/\sqrt{\bar{r}}$, где $\bar{r}$ есть размерность рассматриваемого конфигурационного пространства, так как правило нормировки $\int |\Psi|^2 \, dr = 1$ должно давать безразмерную величину вероятности. Однако говорить о размерности имеет смысл только в том случае, если у нас есть возможность неограниченного наращивания или деления данной величины, то есть она является

потенциально неограниченной, во всяком случае, неограниченной в той области. которая затрагивается рассматриваемым явлением. Например, физическая размерность длины имеет смысл, если мы рассматриваем движение частицы по классической траектории и можем считать, что любой отрезок в пространстве можно, если это необходимо, разделить на несколько частей. Именно эта потенциальная неограниченность позволяет использовать различные системы единиц, что и делает понятие размерности физически осмысленным. Хотя, разумеется, и длина в пространстве не может считаться абсолютно делимой, просто элементарная длина столь мала, что при рассмотрении одной квантовой частицы или нескольких классических наличие этой элементарной длины никак не сказывается на наших моделях, и потому мы можем пользоваться предположением о том, что длина в пространстве неограниченно делима.

Если мы рассматриваем одну квантовую частицу, то амплитуду можно считать непрерывной, и, соответственно, она имеет размерность. Однако при наращивании числа частиц ситуация резко меняется. Поскольку общее число всех возможных состояний такой системы растет как экспонента от числа входящих в нее частиц, мы очень быстро достигнем такой ситуации, что на одно базисное состояние будет приходиться амплитуда меньшая, чем ε. В этом случае нам придется выбирать то базисное состояние, которое действительно встречается в суперпозиции, и игнорировать остальные. Ниже мы дадим общее описание такой процедуры селекции состояний. Таким образом, в ситуации, когда величина амплитуды приближается к критическому значению ε, за которым следует только нуль и которое нельзя никак разделить, мы вынуждены признать, что приписывание амплитуде физической размерности теряет смысл, так как в такой ситуации мы должны измерять амплитуду в количестве квантов величины ε, то есть в безразмерных величинах.

Заметим, что в этой ситуации потеряет смысл также и представление волновой функции в разных базисах, например, в пространственном или импульсном. Переходы между этими базисами, которые описывает преобразование Фурье, дают верный ответ только в случае непрерывного множества значений амплитуды. Таким образом, в той области, где амплитуды становятся сравнимыми с ε, мы теряем возможность применять представления стандартной квантовой теории! Это и есть следствие абсолютной модели декогерентности.

Абсолютная модель декогерентности будет естественной, если использовать конструктивный математический анализ вместо обыкновенного. Действительно, конструктивная функция $f(x)$ конструктивной вещественной переменной x означает, что мы должны по приближению аргумен-

та уметь указывать приближение значения функции. Иными словами, мы должны быть всегда готовы к тому, что значение аргумента x будет задано очень точным, и тогда наше приближенное значение $f(x)$ также должно получаться очень точным. Это подразумевает, что для конструктивной аналитической техники приемлемым является любое значение кванта амплитуды ε. Как только мы его достигли для значения x, моделирующий алгоритм дает нам точное значение $f(x)$. В следующем параграфе мы покажем, что это имеет очень ясную интерпретацию для соотношения неопределенности Гейзенберга. Как только мы достигаем абсолютной точности в определении положения частицы, мы получаем максимальную неопределенность относительно ее импульса: он может принять значения в диапазоне от нуля до максимального допустимого значения, которое всегда существует в алгоритмике.

Естественно, возникает вопрос о действительном значении ε в природе. Наши алгоритмы не дают нам непосредственно никакой информации относительно этого значения. Такая оценка является прерогативой пользователя модели.

Абсолютная модель более конкретна по сравнению с общей алгоритмической, вытекающей из нашего подхода как такового, и она позволяет кое-что считать. Но она с необходимостью заставляет нас использовать стандартные алгоритмы, вытекающие из матричной алгебры. Мы никогда не стали бы использовать эти алгоритмы, если бы речь шла о моделировании классической динамики. А поскольку мы условились считать декогерентность встроенным свойством нашего формализма, наши алгоритмы должны быть столь же эффективными на классических системах, как и методы классического моделирования, так как классические траектории объектов — это и есть результат полной декогерентности квантовых состояний, возникающих на малых отрезках времени (см. [19]). Значит, мы должны строить алгоритмы, не опираясь исключительно на матричную алгебру, но используя более классические представления. Такое несколько туманное рассуждение будет уточнено в следующем параграфе.

5.4. Метод коллективного поведения

Стандартный метод квантовой теории, заключающийся в представлении состояния n частиц в виде волновой функции $|\Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_1, \ldots, \bar{r}_n)\rangle$, неизбежно ведет к экспоненциальным затратам вычислительных ресурсов. Поэтому для конструктивизации квантовой теории многих частиц нам необходим иной подход к описанию многочастичных состояний. Предлагае-

мый здесь подход называется методом коллективного поведения, так как он основан на том, что одна реальная квантовая частица представляется ансамблем классических частиц, которые являются фактически ее экземплярами. Для того чтобы понять место этого метода в физическом конструктивизме, нам надо сначала сделать несколько вводных замечаний.

5.4.1. Что такое конструктивизм на деле

Мы еще раз подчеркнем, что неизбежность конструктивизации квантовой теории возникает из необходимости ее применения к многочастичным системам. Речь, по существу, идет о новой области: многочастичной квантовой теории, которой еще нет. Необходимая для этого конструктивизация физики означает модификацию ее математического аппарата с применением понятия алгоритма. Несмотря на безусловную справедливость принципа соответствия, то есть сохранение в конструктивизме всего достигнутого в квантовой теории, ее конструктивная форма будет серьезно отличаться от традиционной. Это отличие лежит прежде всего в наборе фундаментальных математических инструментов. Место, которое ранее занималось формулами, будет в конструктивизме занято алгоритмами.

Этот тезис нуждается в некотором осмыслении, так как он разительно отличается от общепринятого в стандартной физике понимания математического аппарата. Кроме того, неверное толкование этого тезиса может вернуть нас к пройденным дискуссиям относительно скрытых параметров квантовой теории, природы фотонов и тому подобных вещей. Ответ, уже данный на подобные вопросы в первых главах, на самом деле традиционен: он сводится к использованию формального аппарата теории алгоритмов. Именно из такого подхода вытекает разделение модели на пользовательскую и административную части и отождествление пользователя модели с оракулом.

Что практически означает конструктивная модификация математического аппарата? Ответ на этот вопрос нельзя найти в ранних работах, посвященных логике квантовой теории; он требует всего арсенала конструктивизма, и — прежде всего — его практической части, заключающейся в построении компьютерных программ. В настоящее время компьютерное моделирование физических задач устроено так: даны формулы, например, дифференциальное уравнение, надо построить его решения, то есть придумать, как его приближать, затем запрограммировать это решение и пропустить программы через компьютер. Но мы уже видели, что одной формулой нельзя описать квантовой динамики. Значит, надо использовать разные формулы: например, одну для классического движения, другую — для

квантового (или: одну — для одной частицы, другую — для многих частиц) и воспроизводить ту же схему. Это и есть компьютерное моделирование в стандартном формализме. Конечно, при расчете окажется, например, что существует граница точности расчетов, определяемая неким зерном ϵ. Но никаких следствий, кроме помехи в вычислении, такое зерно дать не может. С помощью такой схемы можно уточнять решения уже решенных задач. Но на этом пути нет ни малейшей надежды создать квантовую теорию многих частиц, в том понимании, которое мы вкладываем в это понятие, а именно, теорию с возможностью предсказания новых явлений. Стандартная схема обязывает нас использовать квантовый компьютер для моделирования динамики более чем двух частиц, не давая при этом, как мы видели, никакого рецепта его применения к задаче измерения квантовых ансамблей. Иными словами, описанная только что стандартная схема компьютерного моделирования квантовой физики многих частиц является тупиковой.[6]

Что предлагает нам конструктивизм? Он предлагает схему последовательных приближений, точность которых нам заранее не известна! Это значит, что вся динамика нескольких частиц должна быть описана полностью с данным зерном разрешения так, как если бы это зерно и было последней стадией нашего моделирования. То есть модель должна быть правдоподобной на каждом своем этапе и не ссылаться на весь процесс целиком, так как у нас здесь нет актуальных бесконечностей. Для перехода от одного зерна к другому, меньшему, нужна эвристика, то есть *идеология алгоритма*. Метод коллективного поведения будет основан на классической эвристике, то есть построен на понятии частицы. Переход к меньшему зерну пространственного разрешения тогда будет означать добавление новой (фиктивной) частицы, являющейся, по сути, экземпляром реальной; то есть *реальная* частица должна представляться как множество (рой) фиктивных. Это и есть основа эвристики коллективного поведения.

Роевая эвристика сходна с идеологией фейнмановских интегралов по путям. Но она лежит дальше от волновой функции. *Интегралы по путям* есть инструмент вычисления Ψ, и они строятся с расчетом на предельный переход к «точной» волновой функции, свойственный классической математике. При этом классическая механика появляется в пределе $\hbar \to \infty$. Но роевая эвристика не опирается на предельный переход. Мы прибег-

[6]Из этого, разумеется, не следует невозможность получения полезных результатов на стандартном пути, например, нахождение молекулярных спектров. Просто стандартная схема не годится для моделирования сложных задач, и потому с ее помощью нельзя рассчитывать на обнаружение или предсказание принципиально новых эффектов в многочастичных системах. Не следует также считать стандартные вычислительные приемы бесполезными в конструктивизме. Просто их роль с необходимостью должна быть сервисной и служить для отладки программ — не более того.

нем к нему только для того, чтобы показать ее соответствие уравнению Шредингера в том случае, когда вычислительные ресурсы не ограничены, то есть для обоснования принципа соответствия, который должен оставаться незыблемым при переходе к конструктивизму. Но в своей технике роевой подход не нуждается ни в каком предельном переходе. В частности, классическая механика содержится в нем: когда весь рой состоит из одной-единственной частицы, это и есть классическая механика. Это налагает на нас обязанность объяснять излучение фотонов на уровне малых роев, то есть иметь конкретный механизм квантовой электродинамики в терминах отдельных экземпляров реальной заряженной частицы и ее взаимодействия с другими экземплярами той же реальной частицы.

Такая постановка была бы не оправданна в классической математике, так как она прямо противоречит идеологии алгебраических формул вообще. Использование формул уже предполагает происшедшее суммирование «вкладов» виртуальных процессов. Конструктивизм же требует явного рассмотрения этих процессов, в виде историй отдельных экземпляров реальных частиц. Эта методология в действительности была ведущей в квантовой теории, хотя и не имела математического статуса того же уровня, что так называемый гильбертов формализм; примером служит рассмотренный нами ранее вывод Бора дискретных энергетических уровней электрона в атоме водорода. Такой подход не позволяет выписывать алгебраические формулы (ниже мы убедимся в этом на примере приближения к решению уравнения Шредингера для одной частицы), для этого фактически на каждом шаге приближения надо заново строить рой. Но зато это позволяет строить моделирующие алгоритмы, не опираясь на формулы, то есть не используя абстракцию потенциальной осуществимости. Цена, которую мы платим, соответствует тому, что мы получаем взамен: возможность рассматривать сложные системы.

Рассмотрим, что означает переход от пространственного представления волновой функции к ее импульсному представлению с точки зрения роевого подхода. Рой состоит из отдельных частиц, каждая из которых обладает координатами и импульсом. В то же время волновая функция $\Psi(x)$ определяет распределение реальной частицы только по координатам: плотность этого распределения есть $|\Psi(x)|^2$. Информация же о скорости реальной частицы заключена не только в модуле волновой функции, но и в ее фазе $\phi(x)$, где $\Psi = |\Psi|e^{i\phi}$. Для того чтобы видеть распределение импульса реальной частицы, надо перейти к другому базису в гильбертовом пространстве состояний нашей частицы, то есть записать ту же самую волновую функцию в импульсном базисе. С точки зрения математического анализа,

это означает применение преобразования Фурье:

$$\tilde{\Psi}(p) = \int_R \Psi(x) e^{-ixp/h} dx. \tag{5.4}$$

Преобразование Фурье означает, что мы раскладываем наш волновой вектор Ψ по базисам плоских волн e^{ipx}. А плоская волна с точки зрения роя есть набор частиц с одинаковой плотностью, движущихся с одинаковым импульсом p. Выделение такого набора в рое является делом проблематичным, так как у нас есть конечный набор экземпляров, и все импульсы фактически должны быть представлены. Если мы для фиксированного p выделим множество экземпляров, имеющих импульс p, у нас получится довольно редкий набор. Чтобы этот набор был представительным, надо, чтобы общее число экземпляров было бы очень большим. Но тогда лишается смысла роевое представление вообще, так как представление квадрата волновой функции в виде числа реально хранимых в памяти компьютера экземпляров ведет к экспоненциальному перерасходу памяти: именно такова выгода от хранения числа в арифметической записи вместо набора единиц, сумма которых равны этому числу. То есть если мы захотим с помощью роя для одной квантовой частицы вычислять ее импульсное представление с аналитической точностью, нас ждет стопроцентная неудача!

Зачем же тогда нужен метод коллективного поведения? Он нужен только для моделирования сложных процессов с многими частицами. Затратность и непригодность роевого метода для одной частицы есть необходимая плата за возможность моделировать многочастичные задачи, что и является единственной настоящей целью этого метода. Было бы наивно думать, что мы можем овладеть теорией многочастичного мира теми же средствами, которые хороши для одной или двух частиц. Так же наивно считать, что можно сделать это, не жертвуя никакими удобствами из уже достигнутого нами «уровня комфорта» в математическом формализме. Это, разумеется, целиком относится и к кубитовому формализму квантовой информатики, представляющему собой просто дискретную версию гильбертова формализма для многих тел. **Конструктивизация не сводится к дискретной (или кубитовой) версии стандартного гильбертова формализма!** Мы видели (в приложении это проиллюстрировано со всей полнотой), что этот формализм прекрасно работает в нерелятивистском случае. В релятивистском же случае мы сразу сталкиваемся с дефектом этого формализма, когда пытаемся перейти от импульсного представления к координатному для записи фундаментальных взаимодействий электродинамики. Очень показательно, что эта трудность сразу же возникает при рассмотрении трех частиц вме-

сто двух (излучение двух фотонов электроном). В любом случае, как только мы добавляем в рассматриваемую систему новые частицы (даже при возможности рассмотреть ситуацию на классическом суперкомпьютере), так преимущества стандартного формализма исчезают, подобно миражу в пустыне. Я думаю, что это не есть простая случайность, и за такой ситуацией в действительности скрывается очень серьезная и новая физика. Мы идем к ней, беря за основу конструктивизм, что означает алгоритмизируемость всех основных процедур, за исключением экспертной оценки пользователя. Такая роль алгоритма порождает более жесткие требования к эвристике как общей схеме написания такого алгоритма. И здесь мы вынуждены пойти на полный разрыв со стандартным подходом, так как главным для нас теперь будет жесткая экономия вычислительных ресурсов вместо лаконичности языка формул, как в стандартной квантовой механике. Роевой метод как раз и дает нам накой стержень — эвристику, на которую можно опираться при продвижении к моделям квантового мира сложных систем.

5.4.2. Постановка задачи

Вычислительные трудности возникают в стандартной теории уже для случая одной частицы при использовании матричного метода. Пусть ее конфигурационное пространство разбито на N элементов. Это означает, что пространство квантовых состояний имеет размерность N. Как только мы применяем для вычислений матричную алгебру в любой форме, мы заставляем компьютер обрабатывать все траектории эволюции системы, проходящие через все N базисных состояний. В простейшем случае это выражается в вычислении произведения унитарных матриц временной эволюции. Среднее значение модуля матричного элемента унитарной матрицы составляет $1/\sqrt{N}$. Если бы вся интерференция, возникающая в результате эволюции системы, была конструктивной, мы получили бы на выходе матрицу, элементы которой были бы примерно равны $N\ 1/(\sqrt{N}\sqrt{N}) = 1$, в то время как они должны составлять тоже $1/\sqrt{N}$. Это означает, что основная часть интерференции является деструктивной, и большая доля вычислительного ресурса тратится только на то, чтобы выяснить, что вклады от разных траекторий взаимно уничтожают друг друга; например, для динамики, близкой к классической, этот ресурс пойдет на выяснение того, что в рассматриваемой точке конфигурационного пространства частицы нет. Таким образом, вычислительные методы квантовой механики, основанные на матричной алгебре, изначально предполагают большую непроизводительную трату вычислительных ресурсов. Такие методы фактически реализуют римановскую схему интегрирования уравнения Шредингера, при которой за основу берется разбиение конфигурационного пространства на конечные элементы.

Коллективное поведение представляет альтернативный подход, соответствующий лебеговской схеме интегрирования. За основу мы возьмем представителей рассматриваемой квантовой частицы, которые мы будем называть ее экземплярами. Этих экземпляров должно быть не много, и их динамика должна служить хорошим приближением квантовой динамики. Наша главная цель: избежать огромных непроизводительных расходов вычислительных ресурсов, характерных для матричной алгебры. Развив такую технику для одной квантовой частицы, мы можем надеяться на то, что такие методы можно успешно применять и для большого числа частиц.

Этот метод представления квантовой частицы через ее экземпляры мы называем методом коллективного поведения. Такой метод реализует требование жесткой экономии вычислительных ресурсов, которое является базисным требованием алгоритмического подхода. Требование максимально жесткой экономии вычислительных ресурсов не является эстетическим. Это требование позволяет строить такие модели, в которых декогерентность является встроенным свойством модели, а не постулируется, как в копенгагенской квантовой механике. Выше мы показали, как такое требование дает нам классическую урновую схему для борновского распределения вероятности исходов измерений квантовых состояний.

Сначала мы дадим интерпретацию квантовой динамики одной частицы с помощью метода коллективного поведения, а затем перейдем к случаю нескольких частиц. Главной ценой, которую нам придется заплатить за экономное расходование вычислительных ресурсов, будет необходимость строить алгоритмы на основе механизмов взаимодействия экземпляров частицы, а не на основе дифференциальных уравнений. Таких уравнений для метода коллективного поведения построить не удается. Однако эта ситуация имеет и положительные стороны, помимо экономичности расчетов. Модель динамики квантовой частицы становится гораздо ближе к классической, чем при стандартном подходе, и создается возможность более наглядного ее представления.

Предлагаемый подход является прямым обобщением диффузионного метода Монте-Карло на общие решения уравнения Шредингера. Тот факт, что метод ДМК по сравнению с другими методами дает значение энергий стационарных состояний, наиболее близкие к экспериментальным, внушает нам оптимизм в практическом использовании метода коллективного поведения в более сложных задачах.

В сложных системах при эволюции вклад каждой частицы носит уникальный характер. Эволюция одной-единственной частицы в большом ансамбле не может быть повторена. Даже при попытках воспроизвести всю эволюцию большой системы, в положении отдельных составляющих ее ча-

стиц для разных попыток будет разница. То есть эволюция отдельной частицы в большом ансамбле всегда уникальна, в то время как волновая функция есть результат огромного числа повторений одного и того же эксперимента, с одинаковыми условиями. Поэтому использование волновых функций отдельных частиц при рассмотрении большого ансамбля оправдано только в том случае, когда мы намеренно огрубляем поведение такого ансамбля, усредняя его по разным степеням свободы отдельных частиц. Это путь статистической физики. И этот путь усреднения большого ансамбля совершенно не пригоден для анализа по-настоящему сложных систем, таких как живые организмы.

Живой организм бессмысленно изучать методами статистической физики, так как этот усредняющий подход заведомо игнорирует особые физические механизмы, носящие фундаментальный характер и определяющие то, что мы понимаем под словами «живое существо». Принципиально то, что эти механизмы носят фундаментальный характер, а именно: они связаны с запутанностью квантовых состояний нескольких частиц. Запутанность не сводится к взаимодействию, например, к обмену фотонами. Запутанность — это фундаментальный феномен, который проявляется в особой связи между частицами, и именно эта связь дает нам возможность строить масштабируемые модели конструктивной физики. Для моделирования динамики запутанных квантовых состояний нужен специальный вычислительный ресурс, который можно получить, только если сэкономить на отдельно взятых частицах. Именно такую экономию дает нам метод коллективного поведения.

Почему при моделировании сложных систем нам не нужно гнаться за точностью воспроизводства волновых функций отдельных частиц? Потому, что волновая функция — это результат статистической обработки однотипных экспериментов, которых в эволюции сложных систем просто нет. Если мы говорим о координатном и импульсном представлении волновой функции, о матричной алгебре и т. д., мы имеем в виду только свойства гигантских виртуальных статистических ансамблей, состоящих из одной частицы, взятой последовательно в моменты времени $t_0, t_0 + \Delta t, t_0 + 2\Delta t, \ldots$ в одном и том же начальном состоянии. Более того, все реальные эксперименты содержат еще и усреднение по различным реальным частицам, так как если мы, например, измеряем положение электрона, то после такого измерения он приобретает, вообще говоря, огромную скорость, которая будет тем больше, чем точнее мы померяли его положение. И это означает, что для следующего опыта мы уже возьмем другой электрон, и т. д. Мы еще вернемся к обсуждению этого вопроса. Но даже если бы электрон был всего один, многократные его измерения имеют лишь приблизительное от-

ношение к многоэлектронной системе и ее поведению. То есть их можно применять только тогда, когда запутанность играет малую роль, например, при изучении динамики идеального газа. Если же роль запутанности велика, то при моделировании надо распределять ресурс компьютера именно так, чтобы отражать ее динамику. Если мы будем расходовать вычислительный ресурс на точное воспроизводение волновых функций отдельных частиц, мы не сможем изучать сложные системы! Тем более это изучение станет невозможным, если мы начнем воспроизводить волновые функции нескольких частиц. В этом случае компьютер будет занят обработкой экстремальной массы бессмысленных комбинаций состояний отдельных частиц, что можно уподобить известному примеру о попытке воспроизвести литературную поэму с помощью мартышек, хаотически ударяющих по клавиатуре.

Можно было бы попытаться защитить волновые функции отдельных частиц, вознамерившись строить из них незапутанные состояния, или состояния близкие к незапутанным (например, шмидтовские состояния для пар частиц). Это будет неглупым путем, но только для 3–5 частиц. Если игнорировать состояния 3 частиц, не сводимые к шмидтовским (такие существуют уже для 3 кубитов), можно получить некое соответствие с экспериментами, например, по потенциалу химической связи в стационарных состояниях (такие расчеты квантовые химики делают для десятков частиц). Но даже для 3–5 частиц этот путь не даст модели квантовой динамики, то есть, например, реакции ассоциации молекул. Тем более такой эклектический путь не пригоден для моделирования сложных систем, для которых поведение определяется не столько точностью определения потенциалов, сколько правильным описанием запутанных состояний.

Для масштабирования нашей модели необходима более цельная эвристика. Описание классических и квантовых эволюций (а также измерений) должно быть единым. Волновая функция прекрасно справляется со статистикой, но это — одночастичная статистика, и она не распространяется на сложные системы. Именно поэтому нам придется отказаться от описания квантовых состояний с помощью волновых функций и заменить их роевым представлением элементарных частиц. Для сложных систем, где стандартный подход вообще неприменим, метод коллективного поведения дает нам ту нить Ариадны, которая должна привести нас к цели.

5.4.3. Метод Монте-Карло

Для поиска основного состояния (собственного состояния с наименьшей энергией) используется вероятностный метод Монте-Карло, который

можно назвать методом статической диффузии. В этом методе квантовая частица представляется в виде роя ее экземпляров, так что плотность роя будет равна модулю волновой функции основного состояния: $\rho = |\Psi_0|$. Это говорит об ограниченности данного метода, так как его нельзя использовать как вероятностную модель квантовой динамики, в которой плотность роя должна совпадать с квадратом модуля волновой функции. Глубинная причина этого расхождения состоит в том, что метод Монте-Карло является статическим, то есть он не предназначен для моделирования динамики. Динамика требует описания возбужденных состояний, а не только основного. Тем не менее метод Монте-Карло очень прост в использовании, и его можно рассматривать как хорошую стартовую площадку для построения настоящей динамической модели.

Рассмотрим следующий процесс эволюции роя во времени. Пусть для каждого экземпляра с некоторой малой вероятностью p производится его сдвиг на Δx вдоль одной из координатных осей в положительном или отрицательном направлении с равной вероятностью p. С вероятностью $1 - 6p$ экземпляр стоит на месте. Пусть нам задана некоторая скалярная функция V на конфигурационном пространстве. Введем также следующее правило рождения и уничтожения экземпляров. Пусть для каждого экземпляра с вероятностью, пропорциональной V, происходит следующий процесс. Если $V < 0$, то данный экземпляр порождает новый экземпляр, расположенный в той же точке; если $V > 0$, то данный экземпляр уничтожает некоторый другой экземпляр, расположенный на расстоянии, меньшем Δx. Этот процесс мы будем называть статической диффузией. У экземпляров в таком процессе фактически нет скоростей, а участвуют только их координаты.

Теперь сделаем в уравнении Шредингера

$$ih\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi$$

формальную замену переменных вида $t = -i\tau$. Тогда это уравнение примет вид уравнения диффузии

$$h\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{h^2}{2m}\Delta\Psi - V\Psi,$$

которое как раз описывает стационарный диффузионный процесс. Если мы упорядочим уровни энергии в порядке возрастания собственных значений энергии E_n, то эволюция во времени вектора состояния, разложенного по

собственным векторам ϕ_n, будет выглядеть так:

$$\Psi = \sum_n \lambda_n e^{-\frac{i}{h}E_n t}\phi_n.$$

Тогда и разложение решения уравнения диффузии будет иметь вид

$$\Psi(\tau) = \sum_n \lambda_n e^{-\frac{1}{h}E_n \tau}\phi_n.$$

Мы видим, что при $\tau \to \infty$ диффузионный процесс будет сходиться к основному состоянию, так как остальные будут подавлены быстро убывающими экспонентами. Известно, что основное состояние не содержит никаких разностей фаз, то есть просто совпадает со своим модулем. Поэтому для его нахождения надо задать произвольное начальное распределение плотности роя и запустить процесс стационарной диффузии. Он стабилизируется на распределении, пропорциональном основному состоянию. Разумеется, при этом надо следить за тем, чтобы общее число экземпляров в рое не выходило за некоторые пределы. Этого можно легко добиться, добавляя или убавляя экземпляры равномерно в соответствии с уже имеющейся плотностью с помощью варьирования точки отсчета энергии.

Метод ДМК непосредственно обобщается на случай n частиц. При этом экземпляром будет кортеж из n экземпляров каждой из частиц, а конфигурационное пространство будет R^{3n}.

Подчеркнем еще раз, что описанный метод стационарной диффузии предназначен исключительно для поиска основного состояния, то есть для стационарного моделирования. Рождение и исчезновение частиц не дает возможности проследить их индивидуальную историю. Этот недостаток не сказывается непосредственно на сложности расчета основного состояния, но он принципиален для описания динамики, поскольку динамика как раз и является результирующим описанием истории частицы.

5.4.4. Приближения уравнения Шредингера квазиклассическими ансамблями: метод Бома

Опишем метод Бома, который основан на понятии псевдопотенциала. Будем отождествлять квадрат модуля волновой функции с плотностью ансамбля воображаемых частиц, а ее фазу ϕ — с классическим действием. Тогда мы имеем: $\Psi = \rho^{1/2}e^{i\phi/h}$, и $1/m\,\mathrm{grad}\,\phi(\bar{r})$ можно рассматривать

как плотность потока воображаемых частиц. Тогда уравнение Шредингера будет эквивалентно системе таких уравнений:[7]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}\,(\rho/m\ \operatorname{grad}\,\phi) = 0,$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\operatorname{grad}\,\phi)^2 + V + V_1 = 0,$$

где квантовый псевдопотенциал $V_1 = \frac{h^2}{m}(\Delta\rho/\rho + (\operatorname{grad}\,\rho)^2/\rho^2)$ зависит от плотности самих частиц, причем с сингулярностью в нуле. Эти уравнения совпадают с уравнениями динамики потока классических частиц, если предположить, что V_1 имеет физический смысл некоего потенциала. Бомовский подход содержит один серьезный недостаток. Неясен механизм попарного взаимодействия между воображаемыми частицами, который может дать такой псевдопотенциал. Кроме того, особенность в нуле означает, что в зонах с малой плотностью на воображаемые частицы действует некая огромная сила с непредсказуемым направлением, что не дает возможности применить эти уравнения к практическому моделированию квантовой динамики.[8] Глубинная причина этого затруднения состоит в том, что настоящая волновая функция имеет статистическую природу. Ее экспериментальное определение всегда требует большого количества повторных испытаний, так что линейность проявляется только для предельного результата этих испытаний при их числе, стремящемся к бесконечности. Поэтому отказ от простого описания линейности не представляет для моделирования большого недостатка. Однако для эффективного моделирования, как мы увидим ниже, надо будет отказаться не только от этого. Нам будет нужен локальный механизм взаимодействия частиц в динамическом диффузионном рое, сохраняющий индивидуальность каждой. Оказывается, что для обретения такого механизма придется отказаться и от сравнительно красивой систе-

[7] Эти уравнения, по-видимому, выведены Маделунгом. Бом положил их в основу своей интерпретации квантовой теории — и это можно, наряду с фейнмановскими интегралами по путям, считать прообразом предлагаемого нами метода коллективного поведения.

[8] Д. И. Блохинцев в [12] указывал как на главный недостаток такого пути невозможность простой интерпретации линейных свойств решений уравнения Шредингера в терминах гидродинамики. Это не кажется мне недостатком. Противоречие между стохастической природой волновой функции и линейными свойствами уравнения Шредингера невозможно преодолеть ни при какой ансамблевой интерпретации волновой функции, но для построения экономичных механизмов моделирования это и не требуется. Любой метод матричной алгебры страдает врожденной неэффективностью расходования вычислительных ресурсов; в задачах численного моделирования квантовой динамики, особенно в случае многих частиц, все равно надо выбирать между какой-либо разновидностью ансамблевого подхода и квантовым компьютером. Поэтому жертва алгебраической красотой была бы здесь вполне оправдана.

мы дифференциальных уравнений, подобной выписанной выше. Мы сможем выписать систему уравнения только для фиксированного разрешения по пространству! Такова цена, которую надо заплатить за метод построения эффективных алгоритмов.

Наконец, можно исходить из некоторого классического механизма взаимодействия частиц, пусть он задается классическим гамильтонианом $H(x,p)$. Плотность частиц ρ для ансамблей с классическим гамильтонианом взаимодействия будет зависеть как от координаты x, так и от импульса p и будет подчиняться уравнению Лиувилля

$$\frac{d\rho}{dt} = -\{\rho, H\}$$

для классических скобок Пуассона $\{A,B\} = \frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial x}$. Поведение, задаваемое этим уравнением, не может моделировать квантовую эволюцию с приемлемой точностью, поскольку оно не дает принципиальных квантовых явлений, как, например, рабиевские осцилляции или квантовые спектры. Это означает, что для симуляции квантовой динамики мы должны допустить некоторые элементы в поведении экземпляров, не вытекающие из классической физики.

Какова физическая природа этого поведения? Мы не знаем ответа на этот вопрос. Для динамического диффузионного роя, который мы опишем ниже, можно считать, что экземпляры его тонкого слоя обмениваются виртуальными фотонами с основной частью роя, и в результате этого из градиента плотности роя появляется своеобразная сила, действующая на тонкий слой. Это никак не проясняет происходящего, и потому мы оставляем вопрос о природе этого обмена без ответа. Такое умолчание никак не помешает нам строить наши алгоритмы, и мы можем вернуться к этому вопросу, когда возникнет необходимость.[9]

5.5. Квантовый рой

Введение роя точечных частиц для описания квантового состояния вытекает из стремления дать явное описание пространству элементарных исходов для вероятностной схемы определения координат квантовой частицы.

[9] В работе [23] предложено считать такое поведение результатом действия неких преквантовых полей. В модели Кальдера – Легетта для декогеренции квантовой частицы она взаимодействует с «ванной» из гармонических осцилляторов, придающих ей случайную скорость. Такие модели исходит из стандартного квантового формализма, тогда как вводимый нами динамический диффузионный рой предназначен для использования вместо этого формализма.

Выбор одного элемента такого роя эквивалентен измерению координат реальной частицы, и потому плотность роя должна приблизительно равняться $|\Psi(\bar{r})|^2$. Динамика роя должна обеспечивать соблюдение этого условия в любой момент времени (по крайней мере, не слишком далекий от начального), так что уравнение Шредингера должно быть вполне заменено такой динамикой.

Ниже мы увидим, почему определение этой динамики не может быть сведено к традиционному вычислению на компьютере непрерывных функций, подобно тому, как это делается в процессе применения обычных численных методов, наподобие разностных схем решения дифференциальных уравнений. Поэтому неизвестно, можно ли вообще обосновать применение описываемых ниже алгоритмических эвристик с той же степенью строгости, как, например, фейнмановские интегралы по путям. Уже в случае одной реальной частицы при описании поведения ее роя мы вынуждены полагаться на алгоритмы в существенно большей мере, чем в диффузионном методе Монте-Карло. Причина этого состоит именно в том, что мы хотим иметь явное представление элементарных исходов для квантового объекта. Это означает, что мы должны вывести волновую функцию из ряда первопринципных понятий и отказаться от ее использования в основных шагах моделирования. Разумеется, мы не хотим вообще отказаться от волновой функции Ψ. Просто ее роль в конструктивизме — это роль отладчика программы на этапе прояснения эвристики; после завершения построения эвристики моделирующих алгоритмов мы откажемся от волновой функции.

Переход к явным исходам в виде роя ставит перед нами совершенно новую проблему, которой не существовало в стандартной квантовой механике. Мы увидим, что такой рой критически зависит от выбора зерна пространственного разрешения dx, что не дает нам возможности естественно применять методы математического анализа. Но, тем не менее, мы будем использовать аналитические понятия, требующие предельного перехода, при определении динамики роя, например, понятие плотности. Можно ли полностью вытеснить такие понятия, заменив их, скажем, неким механизмом индивидуальных взаимодействий элементов роя друг с другом? Мне не известен ответ на этот вопрос. Практическое моделирование показывает на то, что такой радикальный отказ от математического анализа вряд ли возможен.

Дело в том, что динамический рой, которым мы намереваемся заменить уравнение Шредингера, имеет особую природу. С одной стороны, он состоит из элементарных исходов, которые моделируют выбор при измерении координаты. С другой стороны, это свойство должно поддерживаться в произвольный момент времени, по крайней мере, для близких времен.

Мы имеем дело с набором сценариев для квантовой частицы, для которых нам, фактически, открыта возможность для путешествий во времени в пределах каждого сценария. Такая возможность для единственной частицы представляет собой некоторое излишество. Но для моделирования многих частиц такое путешествие во времени — необходимость, потому что от того, сколько и какие частицы мы включим в рассмотрение, зависит зерно dx, а значит, и сам рой. Если бы мы исключили возможность использования аналитических элементов в эвристике наших алгоритмов и попытались свести все к взаимодействию индивидуальных экземпляров роя, мы попали бы в ловушку самоприменимости, лежащую в основе логических парадоксов. Нам необходим прием, стирающий память о конкретных сценариях, то есть аналитический прием, наподобие усреднения, применяющегося для вычисления плотности. Это не есть отход от конструктивности, потому что в любом случае основой будет алгоритмическая эвристика.

Мы будем называть роем конечное множество S, состоящее из N штук однотипных классических точечных частиц, каждая из которых $s \in S$ обладает своими координатами и импульсом $x(s),\ p(s) \in R^3$. В методе классического поведения одна квантовая частица представляется в виде роя S, каждый элемент которого $s \in S$ имеет те же массу и заряд. Элементы такого роя называются в этом случае экземплярами данной квантовой частицы. Мы будем предполагать, что число элементов n роя настолько велико, что его можно использовать как приближение непрерывной среды, то есть если для наших целей понадобится перейти ко все более и более мелкому делению пространства на маленькие кубики, то на каждом шаге в каждый кубик попадут какие-то экземпляры. В дальнейшем мы увидим, что для приближения квантовой динамики дисперсия скоростей экземпляров должна будет расти с уменьшением зерна пространственного разбиения. Это означает, что мы будем иметь отдельный рой для всякого выбранного значения пространственного зерна δx.

Плотность роя в точке x определяется выражением

$$\rho(r,t) = \frac{N(r,t)}{N(\delta x)^3}, \tag{5.5}$$

где $N(r,t)$ обозначает число экземпляров, попавших в момент t в один кубик со стороной δx с центром в точке r. Для сравнения с решением уравнения Шредингера надо было бы устремить в этом определении $\delta x \to 0$, что предполагало бы, что мы рассматриваем не один рой, а последовательность роев с плотностями ρ_n с возрастающим n. Мы не будем этого делать, чтобы не загромождать изложение, а будем считать, что всякий раз, как только

возникнет необходимость, мы сможем разбить наше деление пространства на кубики так, чтобы δx уменьшилось бы в допустимых пределах. Мы будем писать $\rho(x) = |\Psi(x)|^2$, это означает, что

$$\rho_n(x) \to |\Psi(x)|^2 (n \to \infty), \tag{5.6}$$

не оговаривая этого специально. Такую последовательность роев, реализующих приближение к плотности волновой функции, являющейся решением уравнения Шредингера, мы будем называть допустимым приближением квантовой эволюции.

Нашей очередной задачей будет определение поведения экземпляров роя, которое давало бы допустимое приближение к квантовой эволюции. Только это поведение и будет иметь ценность в многочастичных задачах, потому что оно определяется на уровне экземпляров, а не на уровне волновой функции.

Основные требования для симуляции квантовой динамики через коллективное поведение следующие.

- Квантовая динамика симулируется через динамику роя экземпляров, так что в каждый момент времени t равенство

  $$|\Psi(x,t)|^2 = \rho(x,t) \tag{5.7}$$

  выполняется в каждой точке x пространства, с точностью порядка $o(\delta x)$.

- Каждый экземпляр роя имеет собственную историю, то есть он сохраняет свой индивидуальный номер в течение всего процесса моделирования во всех преобразованиях. Тип экземпляра в точности соответствует типу реальной физической частицы.

- Поведение каждого экземпляра полностью определено его собственным состоянием, состоянием всех экземпляров в его ближайшем окружении.

Рой, удовлетворяющий таким условиям, мы назовем квантовым.

Наша задача — определить поведение экземпляров роя так, чтобы он оставался квантовым как можно дольше. Для этого сначала мы покажем, что для решения $\Psi(x,t)$ уравнения Шредингера можно передвигать его экземпляры только локально, то есть на малое расстояние, для обеспечения в любой момент равенства (5.7). Такое передвижение не может быть описано никаким классическим гамильтонианом взаимодействия между экземплярами, но мы покажем, как можно получать его приближенно на основе так называемого динамического диффузионного механизма.

Заметим, что второе правило означает, что мы отказываемся от использования комплексных чисел и одновременно хотим в будущем включить в нашу модель КЭД. Последнее требование означает локальность всех взаимодействий. Поведение экземпляра есть правило, определяющее изменение его внутреннего состояния (импульса, момента импульса и типа) и пространственного положения (пространственный сдвиг). Ввиду того, что уравнение Лиувилля не эквивалентно уравнению Шредингера, это поведение не может определяться классической физикой.

Наличие у каждого экземпляра своей собственной истории означает, что мы требуем полного согласования вероятностных пространств для измерений положения реальной частицы во всех моментах времени. Если бы мы не заботились о таком согласовании, то вероятностные пространства для отдельных и никак не связанных моментов времени у нас уже имелись бы в стандартной квантовой теории. Но в случае отсутствия такого согласования вероятностных пространств мы лишаемся возможности рассматривать динамические сценарии в случае многих частиц. Для одной-единственной частицы нет никакой проблемы: мы считаем оси координат абсолютными и нас не беспокоит, какой объект отвечает за ее измерение. Но как только мы начинаем рассматривать квантовый коллектив, для его описания необходимо точно знать, что именно явилось причиной того или иного изменения его состояния. Для моделирования квантового коллектива мы должны прослеживать детально его эволюцию как единого целого, и математический аппарат должен нам давать такую возможность. Именно поэтому требование сохранения индивидуальных историй каждого экземпляра необходимо для масштабирования квантовой теории на область многих частиц.

Заметим, что мы можем получить квантовый рой, если не будем накладывать на скорость экземпляров и ее изменение никаких ограничений. Это означает, что экземпляры могут перемещаться в течение одного шага на любые расстояния, так что равенство (5.7) будет выполнено на любом шаге с этой точностью, и это свойство будет сохраняться на протяжении некоторого промежутка времени δt. Но от такого механизма перемещения экземпляров не будет никакого толку, потому что он зависит от знания точного решения уравнения Шредингера, тогда как наша задача — обойтись вообще без волновой функции.

Сначала мы докажем, что существует квантовый рой с локальным перемещением экземпляров, то есть соблюдения (5.7) действительно можно добиться, перемещая экземпляры локально. Затем мы вычислим, как должен меняться со временем поток экземпляров роя через малый элемент поверхности. После этого мы определим сам механизм движения экземпляров, который обеспечивает нам такой вид потока.

Итак, займемся квантовым роем. Мы исходим из уравнения Шредингера

$$ih\frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m}\Delta\Psi(r,t) + V_{pot}(r,t)\Psi(r,t), \tag{5.8}$$

которое можно переписать как

$$\begin{aligned}\Psi_t^r(r) &= -\frac{h}{2m}\Delta\Psi_t^i(r) + \frac{V_{pot}}{h}\Psi^i(r),\\ \Psi_t^i(r) &= \frac{h}{2m}\Delta\Psi_t^r(r) - \frac{V_{pot}}{h}\Psi^r(r)\end{aligned} \tag{5.9}$$

для вещественной и мнимой частей Ψ^r, Ψ^i волновой функции $\Psi = \Psi^r + i\Psi^i$. Нас интересует только эволюция плотности квантового роя, то есть функция

$$\rho(r,t) = (\Psi^r(r,t))^2 + (\Psi^i(r,t))^2.$$

Мы зафиксируем значение δx и применим для аппроксимации вторых производных разностную схему вида

$$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} \approx \frac{\Psi(x+\delta x) + \Psi(x-\delta x) - 2\Psi(x)}{(\delta x)^2}$$

для каждого момента времени, считая волновую функцию удовлетворяющей всем условиям точности такой аппроксимации. Поскольку прибавление к потенциальной энергии V_{pot} любой константы не влияет на квантовую эволюцию плотности квантового роя, мы можем рассмотреть вместо V_{pot} другой, эквивалентный, потенциал вида $V_{pot} + \alpha$, где $\alpha = -\dfrac{3h^2}{m(\delta x)^2}$, что приведет к исчезновению слагаемого $2\Psi(x)$ в разностных схемах для вторых производных по x, y, z (из-за чего возникает коэффициент 3) после их подстановки в уравнение Шредингера. Введем для сокращения записи коэффициент

$$\gamma = \frac{h}{2m}\frac{1}{(\delta x)^2}.$$

Поскольку мы пока не знаем механизма перемещения экземпляров в квантовом рое, предположим, что мы просто либо изымаем некоторое количество экземпляров из каждой клетки, либо помещаем их туда из некоторого запаса. Разобьем эволюцию квантового роя во времени на столь малые участки длины δt, что на каждом из них экземпляры перемещаются только

в пределах двух соседних клеток. Если мы докажем, что эволюция квантового роя на таком участке обеспечивается диффузионным механизмом, это будет справедливо и для всей эволюции, так что наше предположение об обмене между двумя соседними клетками не ограничивает общности. Будем также считать, что эти клетки отличаются друг от друга сдвигом на δx вдоль оси x, что также не ограничит общности. Обозначим центры этих клеток через x и $x_1 = x + \delta x$. Тогда при нашем предположении об обмене слагаемое $\Psi(x - \delta x)$ в разностной схеме тоже исчезает и на рассматриваемом малом участке времени эволюция квантового роя будет определяться следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned} \Psi^r_t(x) &= -\gamma\Psi^i(x_1) + V(x)\Psi^i(x), \\ \Psi^i_t(x) &= \gamma\Psi^r(x_1) - V(x)\Psi^r(x); \end{aligned} \tag{5.10}$$

а также аналогичной системой уравнений полученной заменой x на x_1 и наоборот, где нижний индекс означает дифференцирование по t. Эта система получается в том предположении, что частицы движутся от x к x_1. При движении частиц от x_1 к x получится аналогичная система, с заменой x на x_1 и наоборот. Уравнение Шредингера будет, таким образом, выражать результат общего процесса эволюции, состоящего из этих двух типов случаев, где x и x_1 могут располагаться 6 различными способами вдоль 3 координатных осей. Теперь под участком времени Δt мы понимаем именно такой малый промежуток, в течение которого обмен идет только между x и x_1.

Тогда для такого участка мы будем иметь

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho(x)}{\partial t}|_{x,x_1} &= 2\Psi^i(x)(\gamma\Psi^r(x_1) - V(x)\Psi^r(x)) + \\ &+ 2\Psi^r(x)(-\gamma\Psi^i(x_1) - V(x)\Psi^i(x)) = \\ &= 2\gamma(\Psi^i(x)\Psi^r(x_1) - \Psi^r(x)\Psi^i(x_1)) = \\ &= -\frac{\partial\rho(x_1)}{\partial t}|_{x,x_1}, \end{aligned} \tag{5.11}$$

где через $\frac{\partial\rho(x)}{\partial t}|_{x,x_1}$ обозначен вклад в производную плотности по времени, полученный благодаря перемещению экземпляров через границу, разделяющую кубики, содержащие точки x и x_1. Из этого вытекает, что убыль экземпляров в одной клетке равна прибыли их в другой, то есть эволюция квантового роя удовлетворяет условию локальности, и можно говорить о потоке квантового роя через элемент поверхности в том случае, если мы зафиксировали значение δx.

Мы будем называть $\frac{\partial \rho(x)}{\partial t}|_{x,x_1}$ детальным потоком экземпляров через данную поверхность.

5.5.1. Зависимость квантовой динамики от зерна

Мы подошли к самому главному в описании квантовой динамики: к зависимости от зерна δx. Мы не можем сказать, что выражение (5.11) определяет число экземпляров, прошедших через данную поверхность в единицу времени. Выражение для детального потока (5.11) не есть выражение для обыкновенного потока частиц через поверхность. Причина в том, что оно критически зависит от выбора значения δx, и это значение нельзя устремить к нулю. К рою неприменим фундаментальный прием математического анализа, состоящий в том, что можно неограниченно измельчать промежутки вида (x, x_1) и переходить к пределу при $\delta x \to \infty$, так что все значения групповых величин (плотность и скорость) сохранят свои значения (и даже их уточнят). Выражение (5.11) косвенно указывает на то, что в рое присутствуют экземпляры с принципиально разными скоростями, так что мы не можем говорить о скорости всего роя в данной точке. Рассмотрим две части роя, которые мы будем условно называть быстрой и медленной. Механизм перемещения экземпляров быстрой части состоит в том, что каждый из них на каждом шаге Δt прыгает в направлении его скорости на число ячеек, пропорциональное Δt. Механизм перемещения экземпляра медленной части роя состоит в том, что он ждет число шагов, пропорциональное $1/\Delta t$, стоя на месте, и только потом перемещается ровно на один шаг по направлению своей скорости. В этом случае мы уже не можем для детального потока написать выражение

$$\frac{\partial \rho(r,t)}{\partial t} = \frac{1}{N(\delta x)^3} \int\limits_{S(r)} \bar{p}(r,t)\bar{n}(\bar{r}_1)ds(r_1), \tag{5.12}$$

справедливое для обыкновенного потока частиц p. Вместо этого надо использовать выражение

$$\frac{\partial \rho(r,t)}{\partial t} = \frac{1}{N(\delta x)^3} \int\limits_{S(r)} \bar{p}(r,t)|_{(x,x_1)}\bar{n}(\bar{r}_1)ds(r_1) + \Lambda, \tag{5.13}$$

где $p(r,t)|_{(x,x_1)}$ есть число экземпляров, перемещаемых из ячейки в ячейку на границе шара S при фиксации шагов δx и Δt по пространству и времени, где слагаемое Λ имеет следующую природу.

Пусть мы зафиксировали δx и Δt. Чтобы написать выражение (5.12), надо гарантировать, что все экземпляры быстрой части роя, прошедшие через границу в направлении r, останутся в шаре, а не выскочат из него из-за своей большой скорости. Для того чтобы это гарантировать, необходимо сделать Δt достаточно малым. Но тогда экземпляры медленной части роя вообще не успеют сдвинуться с места! Для обеспечения движения как быстрых, так и медленных экземпляров есть только одно средство: уменьшить зерно δx. Но именно этого мы и не можем сделать, потому что тогда сразу же возрастет скорость быстрой части роя, и нам придется рассматривать уже совсем другой рой.

Таким образом, дискретный характер перемещения экземпляров быстрой и медленной частей роя нельзя заменить непрерывным движением, как в случае классической сплошной среды. Слагаемое Λ имеет смысл фазового перехода между быстрой и медленной частями роя. Условно можно считать медленную часть жидкой фракцией (или твердой, если скорость строго равна нулю), а быструю часть — газообразной фракцией роя. Прыжок быстрого экземпляра означает, что он исчезает в одной ячейке, после чего появляется в другой ячейке, которая может не граничить с первой. Таким образом, обычный поток может в квантовом рое меняться скачкообразно.

Неприменимость к квантовому рою обычных аналитических приемов формально не означает невозможности обоснования предлагаемого нами пути моделирования с помощью классической математики вообще.[10] Я не исключаю нахождение такого обоснования, но только для случая одной реальной частицы. Найти классическое обоснование метода коллективного поведения в его общей форме, для многих частиц, не представляется мне возможным, потому что здесь центральную роль играет ограниченность количества экземпляров, что делает невозможным применение самой идеологии математического анализа. Это, в частности, означает и бесперспективность попыток найти строгое математическое доказательство того, что предложенный ниже механизм перемещения экземпляров роя во всех случаях дает хорошее приближение точного решения уравнения Шредингера. Поэтому следующие ниже обоснования предлагаемых механизмов перемещения экземпляров роя следует понимать как пояснения к работе алгоритма, но не как строгое доказательство его пригодности во всех случаях. Общая идеология конструктивизма предлагает нам одно: полагаться на непосредственное компьютерное моделирование.

[10] В случае дельта-функции Дирака классическое математическое обоснование было найдено в виде линейных функционалов.

5.5.2. Механизм изменения скорости

Введем следующие параметры, зависящие от δx:

$$I = \frac{h^2}{2m^2(\delta x)^3},\ \kappa = \frac{h}{m\,\delta x}, \tag{5.14}$$

где h есть постоянная Планка. Параметр I называется интенсивностью обмена, κ — интенсивностью потенциала.

Теперь для построения механизма изменения скорости экземпляров квантового роя мы найдем изменение детального потока $\frac{\partial}{\partial t}p|_{(x,x_1)}\ \vec{n}dS$ квантового роя через поверхность малого кубика, нормаль к которой параллельна оси OX. Для этого надо продифференцировать выражение (5.11) по времени:

$$\begin{aligned}
\vec{p}_t' &= 2\gamma[(\gamma\Psi^r(x_1) - V(x)\Psi^r(x))\Psi^r(x_1) + \Psi^i(x)(-\gamma\Psi^i(x) + V(x_1)\Psi^i(x_1)) - \\
&- (-\gamma\Psi^i(x_1) + V(x)\Psi^i(x))\Psi^i(x_1) - \Psi^r(x)(\gamma\Psi^r(x) - V(x_1)\Psi^r(x_1))] = \\
&= 2\gamma^2(\Psi^r(x_1))^2 - 2\gamma V(x)\Psi^r(x)\Psi^r(x_1) - 2\gamma^2(\Psi^i(x))^2 + \\
&+ 2\gamma V(x_1)\Psi^i(x)\Psi^i(x_1) + 2\gamma^2(\Psi^i(x_1))^2 - 2\gamma V(x)\Psi^i(x)\Psi^i(x_1) - \\
&- 2\gamma^2(\Psi^r(x))^2 + 2\gamma V(x_1)\Psi^r(x)\Psi^r(x_1) = \\
&= 2\gamma^2((\Psi^r(x_1))^2 + (\Psi^i(x_1))^2 - ((\Psi^r(x))^2 + (\Psi^i(x))^2)) + \\
&+ 2\gamma[(V(x_1) - V(x))((\Psi^r(x))^2 + (\Psi^i(x))^2) + o(\delta x)],
\end{aligned} \tag{5.15}$$

где $o(\delta x) = (\Psi^r(x)\Psi^r(x_1) + \Psi^i(x)\Psi^i(x_1) - ((\Psi^r(x))^2 + (\Psi^i(x))^2))(V(x_1) - V(x))$.

Таким образом, мы можем написать для детального потока формулу

$$\Delta p|_{(x,x_1)} = (-I\nabla\rho - \kappa\rho\nabla V)\Delta t. \tag{5.16}$$

Заметим, что если бы мы не игнорировали обмен на границе между x_1 и следующей ячейкой x_2, то приведенное выше вычисление дало бы нам вторую производную плотности по времени в виде разности производных потоков через две поверхности — x, x_1 и x_1, x_2. Какой механизм изменения скоростей экземпляров в рое следует из формулы (5.16)? Заметим, что если бы все экземпляры были абсолютно равноправны, действие любой силы вида $-\nabla W$ с потенциалом W выражалось бы в виде слагаемого вида $-\alpha\nabla W\rho$, где α — некоторая константа. Наличие в (5.16) первого слагаемого без сомножителя ρ указывает на то, что плотность роя обладает свойством потенциала, который действует не на весь рой, а только на некоторое подмножество роя, которое мы назовем **тонким слоем**. Пусть общее

число экземпляров роя N и зерно δx подобраны так, что $N\delta x^3 = 1$ в соответствующей системе единиц (см^3). Тогда тонкий слой будет содержать ровно один экземпляр в каждой ячейке пространства. Тогда формула (5.16) означает, что ускорение экземпляров роя происходит по двум причинам: а) ускорение всех экземпляров роя под действием внешнего потенциала (второе слагаемое) и б) ускорение экземпляров тонкого слоя под действием градиента потенциала роя (первое слагаемое). Поскольку мы хотим, чтобы фаза обыкновенной волновой функции просто выражалась через параметры роя (ее градиент, как мы увидим, должен быть пропорционален скорости частиц роя в данной точке), скорость роя должна усредняться на каждом шаге моделирования. Это возможно только при условии, что дополнительная скорость, которую получает тонкий слой в результате действия на него градиента плотности роя, сразу же перераспределяется на все экземпляры роя, находящиеся в той же элементарной ячейке, что и рассматриваемый экземпляр тонкого слоя. То есть динамика роя должна моделироваться по шагам и ее невозможно свести к непрерывному процессу, потому что мы не можем получить корректные уравнения, устремив δx к нулю.[11]

5.5.3. Восстановление волновой функции по динамическому диффузионному рою

Для нахождения соответствия между стандартным описанием квантового состояния через его волновую функцию Ψ и роевым представлением, мы будем предполагать, что последнее описывается парой функций

$$\rho(t,\bar{r}),\ \bar{p}(t,\bar{r}), \tag{5.17}$$

где скалярная функция ρ есть плотность экземпляров, а вектор импульса роя $\bar{p}(r)$ есть сумма скоростей экземпляров роя, попавших в малый кубик со стороной δx и центром в точке r. В импульс роя не входит масса реальной частицы; $p(r)$ есть роевая характеристика, в которой роль «массы» играет число экземпляров.

Такая пара не использует понятия комплексного числа и не дает красивых дифференциальных уравнений шредингеровского типа для ρ и $\bar{p}$. Более того, механизм динамической диффузии, введенный нами для имитации квантовой эволюции, радикально отличается от классических процессов

[11] Есть и еще один аргумент в пользу пошаговой структуры роевой динамики, когда в каждом шаге происходит перераспределение импульса тонкого слоя на весь рой. Для волновой функции $\psi = x$ с плотностью x^2 уравнение Шредингера даст стабилизацию волновой функции на коротком отрезке времени, тогда как классическая динамическая картина с непрерывным ускорением ведет к равномерному увеличению плотности (вторая производная плотности постоянна). Фактически это – разновидность замечания о фракциях роя.

(например, теплопередачи или колебаний) тем, что его интенсивность зависит от выбранного зерна пространственного разрешения. Мы пошли на это ради главного: экономии вычислительных ресурсов, которые не просто нужны для моделирования квантовой динамики сложных систем, но абсолютно необходимы для ее исследования вообще.

Мы покажем, как восстанавливается обычная комплексная волновая функция Ψ по заданному состоянию диффузионного роя (5.17). Эту задачу мы решим только в предположении, что носитель волновой функции связен, то есть любые две точки его можно соединить кривой, не пересекающей область нулевой плотности $\rho = 0$. Это ограничение родственно тому, что имеется в диффузионном методе Монте-Карло. Для этого обратимся к равенству (5.11) и подставим в него выражение для волновой функции через плотность: $\Psi(r) = \sqrt{\rho(r)}\exp(i\phi(r))$. Задача состоит в вычислении фазы $\phi(r)$ волновой функции. Заметим, что поскольку физический смысл имеет только относительная фаза между различными точками, мы можем зафиксировать некоторую точку r и рассматривать фазу другой точки r_1 относительно r. Если r_1 близко к r, уравнение (5.11) дает нам

$$\phi(r) - \phi(r_1) = \arcsin k(\delta x)^2 \frac{\bar{p}(\bar{r} - \bar{r}_1)}{\sqrt{\rho(r)\rho(r_1)}},$$

что приводит к следующей формуле для определения относительной фазы:

$$\phi(r_1) = \int\limits_{\gamma} k(\delta x)^2 \bar{v}\, d\bar{\gamma}, \tag{5.18}$$

где контур γ идет от r к r_1. Это определение явным образом зависит от выбора контура γ, и потому нам надо доказать его корректность, то есть независимость от выбора контура γ.

Отметим, что наш вывод будет корректным только в том случае, когда $\rho > e > 0$ для некоторой константы $e > 0$, то есть плотность должна быть отделена от нуля во всей области рассмотрения. Поскольку фаза определена только с точностью до целого кратного 2π, различные выборы контура могут привести, самое большее, к изменению фазы на такое число, что имеет место в случае, например, возбужденных состояний электрона в атоме водорода с ненулевым магнитным числом. Мы покажем, что интегрирование скорости $\bar{v}$ роя по замкнутому контуру сохраняет свое значение со временем тем точнее, чем меньше зерно пространственного разрешения δx. Из этого будет следовать, что если в начальный момент времени определение (5.18) было корректным, то оно сохранит свою корректность и для следующих моментов времени.

Итак, рассмотрим производную интеграла от скорости роя по замкнутому контуру γ_c. Применяя формулу (5.7) и учитывая, что $\partial\bar{p}/\partial t$ пропорционально $\rho\,\partial\bar{v}/\partial t$, мы получим

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_{\gamma_c}\bar{v}\,d\gamma = -\int\limits_{\gamma_c} A\,I(\delta x)^2\frac{\nabla\rho}{\rho} + B\kappa(\delta x)^2\,\nabla V \tag{5.19}$$

для некоторых A, B. Первое слагаемое даст при интеграции по замкнутому контуру нуль, так как это $\nabla\ln\rho$; нуль даст и второе по аналогичным соображениям.

Теперь достаточно убедиться в том, что определение (5.18) корректно в начальный момент времени, что производится непосредственно для любой задачи. В случае, если волновую функцию начального состояния можно получить из основного состояния в кулоновском поле, где $\bar{v}=0$, корректность следует из доказанного, так как здесь никакого сдвига фазы на $2\pi k$ не будет. Фаза любого стационарного состояния не будет зависеть от точки в пространстве. Если для получения начального состояния в рассматриваемой задаче нам надо стартовать с некоторого возбужденного состояния с набегом фазы, надо предварительно проверить корректность для этого состояния.

Теперь, на основе сделанных вычислений, мы можем написать формулы, связывающие параметры роя с волновой функцией:

$$\begin{aligned} |\Psi(r)| &= \sqrt{\rho(r)},\\ \phi(r) &= \int\limits_{\gamma:\ r_0\to r} k\bar{v}\cdot d\gamma,\\ \bar{v} &= b\nabla\phi(r), \end{aligned} \tag{5.20}$$

для некоторых a, b. Пользуясь этими формулами, можно перейти от волновой функции к рою, и обратно. Это описание имеет две особенности. Во-первых, за шредингеровской динамикой на уровне зерна δx стоит роевая динамика низкого уровня с зернами Δx, Δt, так что есть существенная зависимость параметров роя (интенсивности) от выбранного зерна пространственного разрешения δx. Во-вторых, квантовая динамика предполагает наличие тонкого слоя и специфического поведения экземпляров по отношению к нему.

В формулах (5.20) средняя скорость $\bar{v}$ роя примерно равна средней скорости той части роя, которая не содержит тонкого слоя во всех точках, где плотность роя не стремится к нулю. Там он не дает существенного

вклада в общий импульс, из-за того, что в каждом малом кубике есть только один принадлежащий ему экземпляр. Если мы прикладываем к квантовой частице внешний потенциал V_{pot}, он вносит вклад в импульс роя, потому что действует на его основную часть, не входящую в тонкий слой.

Ситуация изменится, если мы рассмотрим те точки, где плотность роя стремится к нулю. Здесь тонкий слой уже перестанет быть тонким, и вклад в импульс будет вносить как раз основной. В областях, содержащих такие точки, уже нельзя пользоваться равенствами (5.20). Таким образом, при переходе через нули плотности пользоваться этими равенствами надо с осторожностью. Общий рецепт состоит в том, что если мы хотим по плотности восстановить волновую функцию, надо продолжать ее как дифференцируемую.

В качестве примера рассмотрим одномерную частицу в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной π. Стационарные состояния будут с точностью до множителя иметь вид $\sin(nx)$, в частности, основным будет состояние с $n = 1$ и плотностью $\sin^2(x)$. Здесь мы не имеем возможности рассмотреть изменение фазы, потому что нам недоступна область за пределами отрезка $[0, \pi]$. Первое возбужденное состояние $\sin(2x)$ уже дает нам это сделать, потому что нам доступна вся окрестность нуля этой функции $x_0 = \pi/2$. Фаза здесь меняется на π, что означает, что тонкий слой движется. При этом направление его движения очень быстро меняется на противоположное, так что средняя скорость все равно равна нулю. Но наличие такой скорости играет большую роль. Если бы мы установили в середине ямы абсолютно упругую стенку, картина никак бы не изменилась, так как экземпляры, отраженные от нее, в силу симметрии, имели бы в точности такие же скорости, как и те, что прилетели из другой половины (когда стенки нет). Мы не можем рассматривать волновую функцию $|\sin(2x)|$, в которой смены фазы не происходит, а плотность та же, что и для первого возбужденного состояния, по единственной причине: она не дифференцируема. Чтобы сделать ее дифференцируемой, надо изменить ее в окрестности точки $\pi/2$, что приведет к иному поведению роя (в середине будет расти горб).

Смена знака волновой функции при переходе через нуль означает просто наличие мгновенной скорости у тонкого слоя, даже в том случае, когда средняя скорость нулевая.

5.5.4. Алгоритм, моделирующий динамический диффузионный рой

Теперь мы можем решить основную задачу: построить алгоритм для изменения роя во времени. Такой алгоритм будет состоять в последовательном выполнении одной и той же процедуры, которую мы условно назовем

Iterate над текущим состоянием роя. Каждое из таких применений мы называем шагом моделирования. Из предыдущего параграфа вытекает, что

- в конце каждого шага для любого элементарного кубика в конфигурационном пространстве скорость всех экземпляров, содержащихся в этом кубике, одинакова;
- в процессе применения Iterate дисперсия скоростей внутри каждого кубика стремится к бесконечности, если устремить δx к нулю.

Итак, процедура Iterate должна содержать усреднение скоростей экземпляров, попавших в один и тот же кубик. Вряд ли целесообразно искать конкретный «физический» механизм такого усреднения. Экземпляры квантовой частицы не являются независимыми частицами; они — всего лишь ее возможные воплощения. Если бы мы включили время в конфигурационное пространство, мы могли бы считать, что некоторые экземпляры обозначают ту же частицу, но взятую в разные моменты времени (см. далее — обобщение на КЭД). В любом случае «взаимодействие» между экземплярами не может иметь непосредственного физического смысла, а потому его не следует искать; вполне достаточно формулировать алгоритм на языке локальных плотностей роя.

Из приведенных выше соображений вытекает представление процедуры Iterate в виде следующей последовательности действий.

- Подготовка роя к применению аналитических методов.
- Ускорение всех экземпляров тонкого слоя на $-I\nabla\rho(\bar{r})\Delta t$, умноженное на 1 см^4, ускорение всех экземпляров роя на $-\kappa\rho(\bar{r})\nabla V(\bar{r})\Delta t$, умноженное на 1 см^4, перераспределение скоростей экземпляров тонкого слоя на весь рой (в рамках любого кубика).[12]
- Свободный полет всех экземпляров роя с назначенными им скоростями длительности dt.

Пространственное перемещение экземпляров роя может происходить только в первом и третьем пункте; во втором только изменяются их скорости. Первый пункт нуждается в большей детализации, которая связана с компьютерным моделированием и потому может быть объяснена здесь лишь частично, но мы дадим эти разъяснения, потому что они иллюстрируют метод коллективного поведения и конструктивизм в целом.

[12]Умножение на 1 см^4 необходимо для сохранения размерности см/сек скорости. Размерность κ и $V = V_{pot}/\hbar$ составляет см/сек и 1/сек соответственно.

Первый пункт состоит в том, что мы производим **динамическое сглаживание** плотности, то есть приводим ее к виду, который дает возможность вычислять градиент, необходимый нам во втором пункте (детали процесса описаны ниже).

Второй пункт реализуется так. Любой экземпляр роя получает добавку к своей скорости вида $-I\nabla\rho/\rho - \kappa\nabla V$ (с необходимым домножением для учета размерности). Корректность этого приема вытекает из следующего соглашения. Мы будем рассматриваеть такие рои, для которых будет выполняться следующее численное равенство:

$$N\delta x^3 = 1 \tag{5.21}$$

(N — общее число элементов роя). Тогда плотность будет численно равна числу экземпляров, попавших в данный кубик. Деление на ρ будет тогда эквивалентно простому усреднению скоростей внутри кубика, что нам и требуется.[13]

Третий пункт состоит в том, что любой экземпляр, находящийся в точке r и имеющий скорость v, оказывается в точке $r + v\ dt$.

Все наше рассмотрение годится для трехмерного пространства, но мы будем явно рассматривать одномерный случай. Мы считаем, что все экземпляры могут находиться только в точках $0, \delta x\ -\delta x\ , 2\delta x, \ldots$. Тогда все экземпляры, попавшие в одну точку, будут перемещаться одинаково, что вызовет следующий эффект неравномерности. Может оказаться, что либо в какой-то точке вообще не окажется ни одного экземпляра, либо в одной и той же точке окажется сразу много экземпляров. Эффект неравномерности сразу же сделает невозможным подсчет градиента плотности, требуемого во втором пункте. Если бы движение роя подчинялось кассическому дифференциальному уравнению, то есть коэффициент I не зависел бы от δx, мы могли бы применить сглаживающий прием, какие обычно применяются для численного решения дифференциальных уравнений, например, мы могли бы приближенно заменить возникающие разрывы кусками гладких функций. Но проблема состоит в том, что I критически зависит от выбора зерна и стремится к бесконечности при его неограниченном уменьшении, а потому простое сглаживание сразу же исказит картину. Поэтому первый пункт является не простым, а динамическим сглаживанием, то есть он не сводится к аппроксимации плотности гладкой функцией, и его надо рассмотреть подробнее.

[13] Заметим, кстати, что из (5.21) вытекает, что если бы мы стали варьировать толщину тонкого слоя, то скорость, полученная экземплярами в результате ускорения тонкого слоя, зависела бы только от этой толщины, но не от зерна пространственного разрешения δx.

Мы должны разделить возникающие после третьего пункта разрывы на два типа: ямы и пики. Это деление условно, поскольку ямы могут чередоваться с пиками, и, в конечном счете, такое разделение является вопросом реализации алгоритма, который мы формулируем нестрого. Тем не менее, это разделение принципиально, потому что ямы и пики ведут себя совершенно по-разному. Мы рассмотрим только идеальный случай, когда яма (пик) появляется как уменьшение (увеличение) числа экземпляров в одной точке, тогда как в ее окрестности плотность примерно одинакова.

Представим себе, что мы уменьшили зерно разрешения пространства, для того чтобы сгладить яму, уменьшив при этом промежуток времени dt так, чтобы скомпенсировать возрастание I. Тогда яма сгладилась бы так, что скорость экземпляров при этом осталась бы прежней, потому что потоки с противоположных склонов ямы взаимно остановили бы друг друга (они направлены друг на друга). В случае пика ситуация была бы иной. Здесь потоки направлены в противоположные стороны, и они не могут уравновесить скорости друг друга. Пик даст нам «взрыв» составляющих его экземпляров, которые разлетятся в противоположные стороны именно так, как взрывается дельта-функция (см. выше): а именно все экземпляры пика высоты h должны равномерно распределиться по отрезку длины $2l$ с центром в основании пика, где $l = v_{\max} dt$, $v_{\max} = Ih/\delta x$, так что распределение скоростей среди этих экземпляров имеет вид $v = x/dt$ в системе координат с центром в основании пика. После такого перераспределения надо опять перераспределить скорости в каждой точке равномерномерно. Такова процедура динамического сглаживания в случае одного-единственного пика. В случае нескольких пиков эта процедура должна быть естественным образом обобщена.

Таким же образом производится динамическое сглаживание в случае разрыва плотности первого рода, при котором есть ее неравные пределы слева и справа от некоторой точки. В этом случае сглаживание можно произвести последовательным перераспределением экземпляров более высокого края так, чтобы в результате вместо резкого обрыва получился бы склон с тангенсом угла наклона $1/\delta x$.

В качестве иллюстрации рассмотрим примеры.

Первый пример — расплывание плотности в виде гауссиана $\frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\{-\frac{x^2}{t}\}$. В этом случае ускорение, полученное роем в точке x, будет пропорционально Ix, и при моделировании его расплывания мы получим чередование пиков и ям. Здесь динамическое сглаживание можно произвести путем выбора новых разрешений δx, больших первоначального, с тем, чтобы сгладить ямы и пики, получив нечто вроде частотной гисто-

граммы для нормального распределения. Но если мы немного усложним задачу, рассмотрев два сталкивающихся гауссиана, никакой прием варьирования разрешения уже не даст результата, потому что здесь из-за наплывания вертикальных «полосок» плотности появятся истинные пики, и нам придется использовать модель «взрыва пиков».

Второй пример — плотность вида $\sin^2 x$, которая должна оставаться примерно постоянной в бесконечно глубокой потенциальной яме от 0 до π. Действие потенциала мы представим в виде упругого отскока экземпляров от стенок ямы как при свободном полете, так и в ходе динамического сглаживания. В этом примере обработка пиков будет иметь принципиальное значение и должна производиться точно, а не в виде вариации зерна, как в предыдущем примере. Точность реализации динамического сглаживания необходима для того, чтобы отличить $\sin^2 x$ от других функций, например, от кусочно-линейного распределения плотности на данном отрезке; все другие функции, не обладающие нулями на $[0, 1]$, не должны оставаться постоянными при эволюции, в отличие от $\sin^2 x$.

Скорость, которую приобретут экземпляры роя, находящиеся в точке $x+\pi/2$, в результате выполнения пункта 2 процедуры Iterate, равна $\rho'_x/\rho = \operatorname{tg} x$. Аналогичное вычисление для симметричной кусочно-линейной плотности даст $1/(x-\pi/2)$. Из этого уже ясно, что кусочно-линейная плотность не будет сохраняться с течением времени, так как она не равна нулю при $x = 0$, а терпит в нуле разрыв первого рода, в отличие от $\operatorname{tg} x$. Но для функции $\sin^3 x$ эта грубая оценка уже не пройдет, и отличить ее от $\sin^2 x$ можно только точной реализацией динамического сглаживания.

Динамическое сглаживание в нашем примере будет иметь следующий вид. Надо выбрать dt столь малым, чтобы первыми в движение пришла группа экземпляров S, состоящая из тех, что расположены ближе всех к стенкам, в то время как все иные стояли бы на месте. Эта группа S, оттолкнувшись от стенки, полетит в противоположном направлении, в результате чего возникнет пик первого уровня. В результате его «взрыва» скорость экземпляров, лежащих на расстоянии l от этого пика ближе к центру ямы, поменяет знак, в то время как более дальние экземпляры будут по-прежнему иметь скорость, которую они получили в результате действия градиента роя. По этой причине возникнет пик второго уровня, лежащий ближе к центру. Далее все повторится, то есть возникнут пики третьего уровня, четвертого, и т. д. Эти пики будут с замедлением «подниматься вверх по склону плотности». Они и будут держать плотность $\sin^2 x$ неизменной, уравновешивая действие градиента плотности. При этом пики низшего уровня будут возникать и «взрываться» чаще, чем пики более высокого уровня, и вклад пиков в плотность будет очень мал. Разница частот возникновения пиков

разного уровня может говорить о целесообразности варьирования промежутка времени dt.

Аналогичная картина возникает при любом стягивающем потенциале, например, для ямы конечной глубины. При конечной глубине ямы за ее пределы, при достаточно малом зерне δx, обязательно будет попадать часть роя (например, экземпляры из взорвавшихся пиков), что обеспечивает туннелирование через потенциальный барьер, рабиевские осцилляции частицы в двухъямном потенциале и другие стандартные эффекты уравнения Шредингера. Воспроизведение этих эффектов на основе изложенной роевой эвристики представляет важную алгоритмическую задачу.

5.6. Обсуждение

Сравним определенный нами динамический диффузионный рой с ансамблем, используемым в диффузионном методе Монте-Карло (будем называть этот ансамбль стационарным диффузионным роем). Состояние динамического диффузионного роя определяется заданием координат и скоростей всех его экземпляров, тогда как состояние стационарного роя определяется только его плотностью, ибо средняя скорость его экземпляров равна нулю. Действительно, шаг эволюции стационарного роя состоит в том, что для всякого его экземпляра либо с равной вероятностью выбирается один из возможных сдвигов (вверх, вниз, вправо или влево), либо же он остается на месте. Этот выбор никак не зависит от первоначальной скорости экземпляра, то есть импульс здесь не сохраняется, и суммарный импульс в любом кубике окажется равным нулю. Такая модель соответствует распространению молекул какого-либо вещества в среде из другого вещества, например, краски в воде. Если мы обращаем внимание только на молекулы краски, то их импульс не будет сохраняться: он передается молекулам воды. Стационарную модель диффузии можно поэтому назвать еще моделью с трением.

В противоположность стационарному рою, динамический диффузионный рой эволюционирует с сохранением импульса. Поэтому состояние динамического роя характеризуется не только плотностью его экземпляров, но еще и суммарной скоростью их в каждом кубике пространства, то есть состояние динамического роя описывается парой функций $(\rho(\bar{r},t),\ \bar{p}\,(\bar{r},t))$.

Но самым важным преимуществом ДДР по сравнению с известными ансамблевыми методами является то, что каждая частица роя имеет собственную историю, которая выражается в ее скорости. Это оправдывает наименование этих частиц экземплярами исходной квантовой частицы.

ДДР дает возможность единообразного рассмотрения частицы: как с классической, так и с квантовой точки зрения. Для перехода от классического описания к квантовому и наоборот надо всего лишь размножить (или, соответственно, объединить) экземпляры роя; при этом в рое, соответствующем классической частице, будет всего один экземпляр — она сама. Можно также регулировать выделение компьютерной памяти при моделировании, учитывая, что точность квантового описания будет расти с ростом числа экземпляров роя.

Сделаем одно замечание, касающееся законов сохранения в динамическом диффузионном рое. Их выполнение будет вытекать из того, что его эволюция будет служить приближением точного решения уравнения Шредингера. Но для моделирования важно знать, как эти законы действуют на каждом шаге эволюции роя. Мы предполагаем, что носитель роя (область конфигурационного пространства, где есть его экземпляры) ограничена. Тогда из второго правила вытекает выполнение закона сохранения импульса и момента импульса. При компьютерном моделировании для более точного соблюдения баланса импульсов и моментов надо брать промежутки пространства и времени Δt и δx, на которых производится моделирование, как можно меньше.

Теперь рассмотрим вопрос сохранения энергии. Он менее тривиален, поскольку ускорение экземпляров тонкого слоя происходит и без внешнего источника энергии, под действием потенциала самой плотности (второй пункт). Мы предположим, что каждый экземпляр роя обладает внутренней потенциальной энергией. Таким образом, потенциальная энергия роя, заключенная в некоторой области, пропорциональна числу экземпляров роя в ней. Рассмотрим тонкий цилиндр, соединяющий точки $\bar{r}_1$ и $\bar{r}_2$. Если это — близкие точки, расположенные на расстоянии δx, можно считать, что плотность роя меняется линейно при движении вдоль цилиндра. Для простоты пусть плотность в точке $\bar{r}_1$ нулевая, а в $\bar{r}_2$ численно равна δx. Тогда число всех экземпляров роя внутри цилиндра будет пропорционально квадрату расстояния между данными точками. Для приближенного рассмотрения динамики роя внутри цилиндра мы прибегнем к следующей аналогии. Будем вместо цилиндра рассматривать двумерную горку песка, имеющую форму прямоугольного треугольника, катетами которого является пол и стена. Песок движется под действием силы тяжести с очень малым трением так, что в движении в любой момент участвует только тонкий слой на поверхности треугольника. Разделим весь песок на порции, каждая из которых представляет часть песка в узком треугольнике с основанием длины Δx, лежащим на стене, и постоянной высотой, равной катету треугольника, лежащему на полу. Масса всех порций будет одинаковой. После скатывания вниз каж-

дой порции мы будем считать, что она представляет собой один экземпляр, принадлежащий тонкому слою нашего роя. Тогда этот экземпляр приобретет скорость, пропорциональную $\sqrt{l}$, где l есть высота, на которой первоначально располагался центр масс соответствующей порции песка. Эти экземпляры не догонят друг друга, потому что скатившийся раньше будет иметь большую скорость. Таким образом, для нас неважно распределение экземпляров внутри каждой порции, важно только то, что после завершения действия градиента горки эти порции не будут больше меняться импульсами друг с другом внутри тонкого слоя. Значит, кинетическая энергия каждого такого экземпляра будет пропорциональна l, и их суммарная энергия будет пропорциональна $\int_0^{\delta x} l\, dh = \delta x^2/2$, то есть будет пропорциональной внутренней потенциальной энергии первоначальной кучи.

Представим себе, что мы не знаем выражения для кинетической энергии $mv^2/2$, но хотим получить ее зависимость от скорости, приняв, что весь внутренний потенциал роя (равный числу экземпляров в нашей горке) переходит в кинетическую энергию при полном рассыпании всей горки. Тогда мы получим, что кинетическая энергия отдельного экземпляра должна быть пропорциональной v^2.

Внутренняя потенциальная энергия роя не дает вклада во внешний потенциал V_{pot}; ее связь с этим потенциалом не проста и осуществляется только через изменение плотности роя. Она является аддитивной характеристикой близости экземпляров в самом рое: эта энергия тем больше, чем меньше дисперсия плотности, то есть чем кучнее вид волновой функции частицы. Это и есть иллюстрация закона сохранения энергии в динамическом рое, так как здесь внутренняя потенциальная энергия роя полностью переходит в кинетическую энергию тонкого слоя при полном растекании его плотности по конфигурационному пространству.[14] (Мы не формулируем этот закон явно, а ограничиваемся ссылкой на уравнение Шредингера, где есть сохранение энергии.) Это рассуждение не изменится, если мы возьмем плотность с отличным от единицы градиентом, так как мы всегда можем разбить рой на малые участки, где плотность либо будет постоянной, либо будет меняться с единичной скоростью. Действительно, нам необходимо только сохранять постоянной толщину тонкого слоя, для чего и был необходим единичный градиент. В предельном случае полного расплывания роя вся его внутренняя энергия переходит в кинетическую энергию тонко-

[14]Это растекание ограничено только числом N экземпляров в рое. Данный процесс является полностью релятивистским, так как здесь весь рой переходит в тонкий слой. Релятивистские ограничения оказываются, тем самым, связанными с числом N.

го слоя. Это релятивистский переход. Если мы сильно уменьшим зерно пространственного разрешения, то скорость улетающих экземпляров будет равна предельной скорости c. Если мы хотим получить этот переход быстро, надо сильно сконцентрировать плотность в одном малом кубике, тогда огромный градиент быстро разгонит тонкий слой, который, в свою очередь, поглотит весь рой, переведя его в релятивистское состояние.

Рассмотренная нами конструктивная модель квантовой динамики одной частицы в виде динамического диффузионного роя не сводится к известным подходам, которые можно назвать гидродинамическими. Специфика роя в том, что в нем экземпляры представляют собой актуальные воплощения реальной частицы, включающие историю ее движения. Поэтому, в частности, к динамическому рою нельзя подходить как к ансамблю реальных частиц, ведь это, фактически, набор различных реализаций одной и той же частицы. Например, мы не можем непосредственно применять к такому рою обычные динамические инварианты: импульс, энергия или момент.

Тем не менее, в этом рое существует так называемый тонкий слой, о котором можно сказать, что он ускоряется по действием силы как градиента плотности со знаком минус. Это ускорение не является ускорением всего роя, поскольку тонкий слой на каждом шаге передает свой импульс всему рою. Динамика роя носит, таким образом, принципиально дискретный характер, то есть должна рассматриваться как последовательность шагов, каждый из которых мы назвали процедурой Iterate. Другое проявление дискретного характера роя в том, что он критически зависит от выбора ядра пространственного разрешения δx, поскольку интенсивность действия градиента плотности на тонкий слой пропорциональна δx^{-3}, а интенсивность действия внешнего потенциала на весь рой пропорциональна δx^{-1}. Так что мы принципиально не можем применить к описанию плотности роя стандартный математический анализ, в основе которого лежит возможность устремить δx к нулю так, что при этом сохранятся алгебраические соотношения для дискретного приближения. Это порождает такое явление, как постоянное возникновение пиков, которые невозможно включить в аналитическую версию тонкого слоя и надо обрабатывать отдельно.

Задача моделирования роя требует, таким образом, практического применения конструктивного подхода, то есть практического моделирования, и развития соответствующих приемов.

Почему мы выбрали этот трудный путь для моделирования квантовой динамики? Эстетический мотив состоит в желании придать явный характер элементарным исходам измерения квантовых состояний. Но истинная

ценность роевого подхода в том, что он допускает естественное обобщение на случай многих частиц, при котором декогерентность получает прямое объяснение в рамках рассматриваемой системы, без привлечения понятия «окружение» (см. ниже). Явное объяснение декогерентности необходимо для исключения порочной логической петли, поскольку апелляция к «окружению» всегда оставляет лазейку для включения в это «окружение» самого экспериментатора, что немедленно ведет к появлению парадоксов. Роевой подход представляет единственный путь, ведущий к сложным системам, и мы приступим к его обобщению на случай нескольких реальных частиц.

5.6.1. Метод коллективного поведения для многих частиц

Теперь рассмотрим проблему многочастичной квантовой динамики во всей полноте. Главным ориентиром для нас будет многочастичный гильбертов формализм. Мы будем применять его не в алгебраической, а в конструктивной форме, для чего будет введено важнейшее понятие связей между экземплярами. Мы будем группировать экземпляры различных реальных частиц в кортежи, так что каждый кортеж представляет собой одну версию динамики многих частиц. Эта формальная модель очень удобна для описания сложных динамических сценариев, в чем мы убедимся в следующем параграфе.

Пусть нам дано множество n квантовых частиц, которые мы будем нумеровать натуральными числами: $1, 2, \ldots, n$. Мы примем, что главный акт эволюции является реакцией рассеяния, когда эти частицы одновременно налетают друг на друга и могут ассоциироваться в стабильные системы, называемые молекулами, а также распадаться на составные части. Первоначальные частицы могут состоять из неких более элементарных частиц, и в ходе реакции эти более элементарные частицы могут перегруппироваться, формируя продукты реакции, состоящие из тех же элементарных частиц, но в иной конфигурации.

Будем делить всю эволюцию на такие акты рассеяния

$$S_1 \to S_2 \to \ldots \to S_k, \tag{5.22}$$

так что главное (физическое) время выражается нижним индексом состояния S_j нашей системы, а внутреннее время внутри каждого акта рассеяния пренебрежимо мало с точки зрения физического времени и будет иметь физический смысл только внутри самого акта рассеяния. Это означает, что каждый акт рассеяния столь короток, что частицы не успевают изменить

своих положений, но состояние системы при этом акте меняется: S_j переходит в S_{J+1}. Изменение происходит не за счет динамики самих частиц, а за счет изменения их коллективного состояния, которые мы и опишем в данном разделе, опираясь на гильбертов формализм.

Простым примером такой реакции является рассеяние протона на атоме водорода, рассматриваемое нами ниже.

Мы принимаем, что наблюдаемая химическая динамика не зависит от субъядерных состояний, то есть химия определяется только электронами и ядрами атомов. Это, в принципе, под вопросом для очень сложных объектов, но, похоже, верно даже для них, если мы рассматриваем не слишком длинные промежутки времени (более общая структура обсуждается в последней главе). Мы также без обсуждений принимаем, что наше моделирование должно основываться на квантовой механике, и единственной существенно не конвенциальной процедурой будет модель декогерентности.

Самая правильная модель декогерентности, которую мы назвали абсолютной, гласит, что декогерентность является редукцией квантового состояния

$$|\Psi\rangle = \sum_j \lambda_j |j\rangle \tag{5.23}$$

в тот момент, когда память моделирующего компьютера не сможет вместить полную запись этого состояния. Как было нами показано выше, такая модель дает нам правило Борна для вычисления вероятностей исходом измерения квантового состояния системы, и это доказывает корректность данной модели. Но такая форма абсолютной модели декогерентности еще не может служить эвристикой для моделирующего алгоритма, так как у нас пока нет никакого способа моделирования унитарной квантовой динамики для многих частиц, кроме вычислений в рамках матричной алгебры, а этот способ, как мы видели, слишком ресурсоемкий.

Для нахождения работоспособной схемы моделирующего алгоритма мы должны последовательно применять метод коллективного поведения, при котором алгоритмическая редукция квантовых состояний является встроенным свойством. Мы рассмотрим роевые представления наших n частиц $1, 2, \ldots, n$, где $S_1, S_2, \ldots, S_n$ — рои экземпляров, соответствующие их состояниям $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, \ldots, |\Psi_n\rangle$. Если рассмотреть ансамбль, состоящий из всех этих экземпляров, он будет представлять незапутанное состояние вида $|\Psi_1\rangle \bigotimes |\Psi_2\rangle \bigotimes \ldots \bigotimes |\Psi_n\rangle$. Но для представления запутанного состояния вида

$$\Phi\rangle = \sum_{j_1, j_2, \ldots, j_n} \lambda_{j_1, j_2, \ldots, j_n} |j_1, j_2, \ldots, j_n\rangle \tag{5.24}$$

нам нужно ввести новый существенный элемент в метод коллективного поведения. Это – связи между экземплярами разных роев. Базисное состояние j_i можно рассматривать как координаты частицы i в соответствующем конфигурационном пространстве. Представление волновой функции в виде (5.24) означает, что существуют связи, соединяющие точки $j_1, j_2, \ldots, j_n$ в один кортеж. Относительное количество связей такого вида (их общее число, деленное на общее число всех связей) есть $|\lambda_{j_1,j_2,\ldots,j_n}|^2$.

В методе коллективного поведения мы примем, что связи соединяют не пространственные точки, а экземпляры различных реальных частиц. Эти связи можно записать как кортежи

$$\bar{s} = (s_1, s_2, \ldots, s_n), \tag{5.25}$$

где для любого $j = 1, 2, \ldots, n$ $s_j \in S_j$. Волновая функция $|\Phi\rangle$ тогда представляется как множество $\bar{S}$ кортежей $\bar{s}$, так что для любого $j = 1, 2, \ldots,$ $s_j \in S_j$ существует ровно один кортеж вида (5.25). Каждый кортеж играет роль так называемого мира при многомировой интерпретации квантовой теории.[15] Мы рассматриваем этот кортеж (5.25) как пробное представление системы n частиц и считаем, что все взаимодействия идут внутри одного кортежа, тогда как состояние реальной системы получается в результате интерференции амплитуд, соответствующих всем кортежам, оказавшимся в данной пространственной клетке, или другого процесса, заменяющего интерференцию амплитуд. В случае одной частицы мы видели, что таким процессом может быть действие на тонкий слой силы, пропорциональной градиенту плотности роя. Мы увидим, что этот процесс непосредственно обобщается и на случай n частиц. Мы назовем $\bar{S}$ роевым представлением системы n частиц.

Плотность роя $\bar{S}$ определяется как

$$\rho_{\bar{S}}(r_1, r_2, \ldots, r_n) = \lim_{dx \to \infty} \frac{N_{r_1, r_2, \ldots, r_n,\, dx}}{N(dx)^{3n}}, \tag{5.26}$$

где $N_{r_1, r_2, \ldots, r_n,\, dx}$ есть общее число кортежей, оказавшихся в $3n$-мерном кубе со стороной dx и центром $r_1, r_2, \ldots, r_n$, N — общее число кортежей.

Если волновая функция $|\Phi\rangle$ является тензорным произведением одночастичных волновых функций

$$|\Phi\rangle = \bigotimes_{i=1}^{n} |\phi_i\rangle,$$

[15] Строго говоря, для этого надо считать времена t частью кортежа. В нерелятивистской теории полагается рассматривать единое время t.

то соответствующие связи можно получить путем случайного выбора экземпляров из равномерного вероятностного распределения $s_j \in S_j$ для каждого $j = 1, 2, \ldots, n$, которые таким образом и сформируют каждый кортеж $s_1, s_2, \ldots, s_n$. С таким выбором кортежей мы получим, что плотность соответствующего роя удовлетворяет условию Борна, которое можно для роев записать в виде

$$\sum_{\bar{r} \in D} |\langle \bar{r} | \Phi \rangle|^2 = \frac{N_{\bar{r}, \bar{S}}}{N}, \tag{5.27}$$

где $D \subset R^{3n}$, $N_{\bar{r}, \bar{S}}$ есть общее число кортежей, оказавшихся в области D. Но для запутанного состояния $|\Phi\rangle$ такой выбор кортежей для набора роев $\bar{S}$ не даст нам условия (5.27). Мы таким образом должны взять (5.27) за определение выбора кортежей в $\bar{S}$. Но для определения роя мы должны также определить скорости всех экземпляров, а именно, обобщить равенство (5.20) на случай n реальных квантовых частиц.

Пусть $\Psi(r_1, r_2, \ldots, r_n)$ есть волновая функция системы n частиц, $\Psi = |\Psi| \exp(i\phi(r_1, r_2, \ldots, r_n))$ — ее эйлеровское разложение. Мы обозначим через $\nabla_j \phi(r_1, r_2, \ldots, r_n)$ градиент Ψ, взятый по координатам частицы j, где $j \in \{1, 2, \ldots, n\}$ есть фиксированный номер. Обобщение формул (5.20) на n частиц имеет вид

$$\begin{aligned} |\Psi(\bar{r})| &= \sqrt{\rho(\bar{r})}, \\ \phi(r) &= \int\limits_{\bar{\gamma}:\ \bar{r}_0 \to \bar{r}} k\bar{v} \cdot d\gamma, \\ \bar{v} &= a\bar{\nabla}\phi(\bar{r}), \end{aligned} \tag{5.28}$$

где $\bar{r}$ обозначает $r_1, r_2, \ldots, r_n$, $\bar{\nabla}$ обозначает $(\nabla_1, \nabla_2, \ldots, \nabla_n)$, а $\bar{\gamma}$ есть путь в $3n$-мерном пространстве. Правила (5.28) достаточно для определения роя по данной волновой функции, если мы согласимся объединять экземпляры в кортежи независимо от их скоростей. При переходе от случая одной частицы к случаю многих частиц надо вместо экземпляра роя для одной частицы всюду вставлять экземпляр роя для всей системы многих частиц. Микроскопический механизм динамики роя принимает тогда следующую форму. Градиент $\bar{\nabla}\rho$ плотности роя кортежей будет вызывать изменение скорости каждого экземпляра отдельной частицы в тех кортежах, которые входят в тонкий слой. Отдача импульса тонкого слоя всему рою происходит в каждой клетке конфигурационного пространства точно

так же, как в случае одной частицы. Динамическое сглаживание образующихся пиков также происходит по общему правилу. Мы получаем, что этот микроскопический механизм изменения импульса для n частиц обеспечивает приближение n-частичной квантовой динамики с точностью порядка dx для определения волновой функции при фиксированном малом промежутке времени.

Рассмотрим теперь рой экземпляров квантовой системы n частиц. Каждый из них представляет эверетговский квантовый мир и имеет вид $\bar{s} = (s_1, s_2, \ldots, s_n)$. Как такой кортеж получает приращение скоростей $\Delta\bar{p}_{\bar{s}} = (\Delta p_1, \Delta p_2, \ldots, \Delta p_n)$? Для этого он должен находиться в тонком слое. Пусть он уже там находится. Тогда мы рассмотрим все другие кортежи роя, лежащие близко к $\bar{s}$ в смысле метрики n частичного конфигурационного пространства, и найдем градиент их плотности, имеющий вид:

$$\bar{\nabla}\bar{\rho} = (\nabla_1, \nabla_2, \ldots, \nabla_n). \tag{5.29}$$

Теперь каждый экземпляр s_j получает приращение его собственного импульса на $-I\nabla_j$. Элементы кортежа (5.29) не определяются плотностями отдельных частиц. Они определяются плотностью роя для всей системы n частиц. То есть влияние на ∇_j оказывает не только плотность роя j-й частицы, взятой отдельно, но и экземпляры всех других частиц, которые оказались связанными в одни кортежи с окружением j-й частицы, при условии, что эти кортежи лежат близко к $\bar{s}$. Мы могли бы рассматривать только плотности отдельных частиц лишь в том случае, если бы состояние нашей системы было незапутанным.[16] Таким образом, если мы хотим изучать общий случай запутанной системы в роевом представлении, нам надо ввести в рассмотрение связи между экземплярами в кортежах, в частности, принадлежащих к тонкому слою.

Таким образом, случай n реальных частиц рассматривается дословно аналогично случаю одной частицы, только под экземплярами надо понимать кортежи $\bar{s}$.

Пусть m — число экземпляров каждой отдельной частицы. Тогда, в силу нашего условия единственности кортежа, содержащего данный экземпляр любой частицы, у нас будет ровно m различных попарно не пересекающихся кортежей.[17] Если мы устремим число реальных частиц n к беско-

[16] Именно для незапутанных состояний справедливо классическое рассмотрение многочастичных ансамблей.

[17] Если не требовать, чтобы каждый экземпляр какой-либо частицы обязательно входил в один кортеж с каким-либо экземпляром любой другой частицы, мы получим более общий объект многочастичной сети (см. ниже).

нечности, оставив m постоянным, мы будем с ростом числа реальных частиц n получать все большее и большее отклонение нашей модели от точного решения уравнения Шредингера для n частиц. Таким образом, фиксация m означает наличие внутреннего фактора декогерентности, не зависящего ни от какого «окружения». С другой стороны, сложность модели будет возрастать линейно с ростом n, а не экспоненциально, как в стандартном формализме. То есть метод коллективного поведения реализует абсолютную модель декогерентности, которая в нем наступает в силу ограниченности памяти моделирующего компьютера.

Ускорение тонкого слоя в результате действия градиента плотности роя в случае ограниченности числа экземпляров приобретает специфическую форму. Если разбить конфигурационное пространство каждой реальной частицы на s кубиков, то конфигурационное пространство для n частиц окажется разбитым на s^n кубиков. Поэтому мы можем говорить о каком-либо «вычислении градиента плотности» во втором пункте процедуры Iterate только в том случае, когда $m \gg s^n$, то есть когда реальных частиц не много. Если это неравенство не выполнено, разделение силы, действующей на отдельный кортеж со стороны роя, на «аналитически» описываемую составляющую и «обработку» пиков теряет смысл. «Пики» будут фактически повсюду, и надо просто правильно описать процесс их динамического сглаживания.

Рассмотрим крайний вариант, когда $m = 2$, то есть у нас есть всего два экземпляра любой реальной частицы и, следовательно, только два «квантовых мира». Тогда у нас фактически не будет никакого иного инструмента для моделирования разгона такого слоя, кроме взрыва пика, который в каждый момент будет не более чем один. Нам надо производить моделирование динамики каждого «квантового мира» в классических терминах и регистрировать момент «столкновения миров», то есть ситуации, когда оба мира окажутся в одном элементарном кубике общего конфигурационного пространства. Как только это произойдет, надо придать этим «мирам» взаимно противоположные скорости, после чего продолжить моделирование. Более общий случай сети экземпляров рассматривается ниже.

5.6.2. О преимуществах метода динамической диффузии

Метод динамической диффузии очень просто обобщается на n частиц, давая модель квантовой динамики с абсолютной моделью декогерентности. Фактором декогерентности в ней является ограниченное число экземпля-

ров любой реальной частицы, из чего следует ограниченность числа всех квантовых миров. Мы сравним этот метод с фейнмановским методом интегралов по путям.

Напомним, что дискретная версия фейнмановского метода состоит в том, что вместо скоростей экземпляров мы приписываем каждому миру амплитуду, так что скорости распределяются равномерно в некотором большом кубе, складываем на каждом шаге амплитуды всех миров, попавших в малый кубик общего конфигурационного пространства, после чего забываем о старых экземплярах и определяем их заново в соответствии с вычисленными амплитудами. Если закон измерения амплитуды каждого экземпляра во времени подчиняется правилу $\lambda(t + \Delta t) = \lambda(t)e^{iS/h}$, где S есть действие данного экземпляра на рассматриваемом шаге, мы получим приближение решения уравнения Шредингера.

Фундаментальное отличие динамического роя от интегралов по путям состоит в том, что все экземпляры в динамическом рое имеют историю, продолжающуюся на протяжении нескольких шагов, тогда как в интегралах по путям время жизни экземпляров составляет только один шаг. Именно наличие у экземпляров роя памяти дает нам эвристику для сложных систем. Из этого вытекает также другое очень важное свойство динамического роя: он представляет собой пространство элементарных исходов для квантового измерения в том смысле, что пространственная плотность его экземпляров совпадает с квадратом модуля волновой функции. Выбор произвольного экземпляра (или мира) динамического роя означает измерение координат рассматриваемой частицы (или системы). Ничего подобного не может быть в интегралах по путям, как и в любом другом методе, использующем волновую функцию: там правило Борна просто постулируется, тогда как пространство элементарных исходов для измерения квантовой системы отсутствует.[18]

Роевой метод, применяемый для решения дифференциального уравнения Шредингера, должен сравниваться с классическими методами решения этого уравнения: аналитическим и численными. Эти методы в любом случае решения дифференциального уравнения фактически являются схемами интегрирования. Классические методы (включая конечно-разностные схемы) реализуют римановскую схему интегрирования. Римановская схема основана на разделении конфигурационного пространства на малые сегменты и представлении решения в виде суммы по таким сегментам

[18]Не следует путать отсутствие с недоступностью. В динамическом рое элементарные исходы известны — это экземпляры, но они недоступны пользователю в силу конструктивной теоремы о недоступности скрытых параметров как невозможности конструктивного распознавания применимости алгоритмов.

вида

$$\sum_{j \in J_K} \Delta x f(x_j). \tag{5.30}$$

Римановская схема (5.30) обладает рядом недостатков. Самый главный из этих недостатков — огромные непроизводительные затраты вычислительных ресурсов, заложенные в эту схему с самого начала. Они заключаются в суммировании по разбиению J_K конфигурационного пространства K. С таким суммированием можно мириться только в том случае, когда само конфигурационное пространство имеет не слишком большую размерность, например, как в случае одной реальной частицы. При росте числа частиц n размерность $\dim(K)$ растет линейно, $O(n)$, а размер разбиения J_K при сохранении точности представления каждой частицы растет как $\exp(n)$, что делает римановскую схему совершенно не масштабируемой, то есть непригодной. Этот фундаментальный дефект римановской схемы имеет известные следствия. Например, она неустойчива в случае сильно разрывных функций, так что многие функции, которые естественно считать интегрируемыми, не могут интегрироваться по римановской схеме.[19] Единственный плюс римановской схемы в том, что она допускает аналитические расчеты — опять-таки для небольших размерностей K.

Предлагаемый нами роевой метод реализует альтернативную схему интергирования — лебеговскую. Она состоит в том, что мы, вместо деления конфигурационного пространства, заводим рой экземпляров, которые просто разбрасываем наугад по этому пространству. После чего мы делим на участки не конфигурационное пространство, а пространство значений самой функции, и составляем сумму вида

$$\sum_i |G_i| f_i, \tag{5.31}$$

где G_i — число экземпляров, значения функции f на которых попали в i-е подразделение, соответствующее характерному значению f_i. Эта схема не столь пригодна для аналитического решения. Но она обладает главным преимуществом: она предельно экономична в алгоритмическом смысле. Здесь

[19] Простейший пример: функция, принимающая значение нуль в рациональных точках и единица в иррациональных. Именно такого рода функции фактически возникают в квантовой механике при рассмотрении, например, интегралов по траекториям. Там при вычислении скорости квантовой частицы, сосредоточенной в малом участке пространства, мы неизбежно будем получать неограниченный разброс значений. То есть график скоростей при большом увеличении будет все больше напоминать пилу с острыми зубцами, а не гладкую кривую.

суммирование совершенно не зависит от сложности конфигурационного пространства, то есть от числа реальных частиц. Все коллективные эффекты содержатся в самих экземплярах, которые целиком в нашем распоряжении.

Важным преимуществом роевого метода является разделение экземпляров рассматриваемой системы по признаку принадлежности к тонкому слою. Такое разделение может оказаться полезным для изучения сложных процессов, где можно будет пользоваться не гильбертовым формализмом как таковым, а эвристиками иных областей.

В терминах роев можно интерпретировать наличие у фотона поляризации, ортогональной импульсу, целиком связана с характером движением заряженного электрона в виде роя в кулоновском поле ядра, а именно — со стабилизацией круговых орбит для экземпляров этого роя. Такая схема сама по себе не дает точных выражений для волновых функций стационарных состояний, то есть уступает стандартному пути решения уравнения Шредингера, после которого такие состояния получаются автоматически. Достоинство роевого метода в другом: он дает эффективное описание динамической картины, которое может быть продолжено и на случай многих частиц, то есть в область, где уравнение Шредингера будет не применимо.

Электродинамические эффекты появляются в конструктивизме как необходимый элемент рисования правильных динамических картинок.[20] Если бы у нас не было квантовой электродинамики, можно было бы пытаться воспроизвести ее с помощью такого рода алгоритмического «рисования». К счастью, этот этап уже пройден,[21] и потому мы можем использовать достижения электродинамики, состоящие в точных формулах для амплитуд испускания фотонов (см. ниже). Такое использование стандартной квантовой теории (СКТ) в качестве отладчика моделирующих программ характерно для конструктивной физики. Оно применяется в сфере применимости СКТ, то есть в задачах, сводящихся к одночастичным. В сложных задачах с динамикой многих частиц СКТ уже не сможет ничем нам помочь, и тогда конструктивные методы «рисования» будут нашей единственной опорой до того момента, как мы сможем воспользоваться эвристикой других наук, например, биологии.

[20] Строго говоря, появление таких методов рисования является реакцией моделирующего алгоритма на экспертное заключение пользователя, которое оформляется в виде оракула в едином алгоритме. Мы обсудим ниже возможности практического использования такого рода оракулов в вычислительных устройствах.

[21] Не без использования приемов «рисования». Сам Максвелл применял шестеренки как наглядный образ для представления фотонов при выводе главных уравнений электродинамики. В конструктивизме мы с неизбежностью должны делать нечто противоположное.

5.7. Селекция квантовых состояний при моделировании многочастичной динамики

Принцип квантовой суперпозиции многочастичных состояний можно сформулировать в форме генетического алгоритма построения многочастичного сценария. Назовем этот алгоритм процедурой селекции квантовых состояний. Предлагаемый в этом разделе алгоритм очень прост и обладает почти универсальной применимостью; например, его можно адаптировать для описания разнообразных химических реакций и фазовых переходов.

Мы определим процесс селекции квантовых состояний в численных экспериментах. Мы стартуем с полуклассического описания процесса рассеяния одной абстрактной частицы, называемой далее пулей, на другой, называемой мишенью. Будем записывать параметры этих частиц именно в таком порядке.

Одна отдельная частица может быть представлена классически как точка в пространстве, обладающая набором атрибутов (масса, заряд, спин и т. д.). Это представление мы назвали экземпляром данной квантовой частицы. Каждый экземпляр имеет свою собственную траекторию как классическая частица. Если мы рассматриваем частицу как квантовую, это означает, что мы ее представляем как ансамбль (рой) ее классических экземпляров. Плотность экземпляров задается формулой

$$\rho(\bar{x}) = \lim_{\delta x \to \infty} \frac{N(\bar{x}, \delta x)}{\delta x^3}.$$

Основное свойство плотности роя, связывающее его с квантовой механикой, — это правило Борна для квантовой вероятности:

$$|\Psi(\bar{x})|^2 = \rho(\bar{x}).$$

В принципе, последнее равенство можно выбрать в качестве определения роевого представления волновой функции. Мы можем пользоваться как методом коллективного поведения, изложенным выше, так и фейнмановскими интегралами по траекториям. В последнем случае среди атрибутов экземпляров будет и их комплексная амплитуда. Удобно считать, что модули всех амплитуд одинаковы и амплитуды различаются только фазой. Тогда каждый экземпляр движется вдоль своей траектории и накапливает амплитуду λ в зависимости от действия данного экземпляра в соответствии с формулой

$$\lambda(t_1) = e^{-\frac{iS(\gamma, t_0, t_1)}{h}}, \quad S(\gamma, t_0, t_1) = \int_{t_0}^{t_1} (E_{kin} - E_{pot}) dt,$$

волновая функция получается суммированием амплитуд всех экземпляров, попавших в кубик, так как было изложено выше.

Альтернативно, мы можем использовать описанный нами выше механизм диффузии в рое экземпляров с обменом импульсами (общий случай) или без него (квазиклассическое приближение, ср. [19]). Мы будем считать, что метод определения индивидуальных траекторий отдельных экземпляров реальных частиц как-то выбран.

Объединенное состояние двух реальных частиц, пули и мишени, в рамках многочастичного квантового гильбертова формализма имеет вид

$$\sum_{j,l} \lambda_{j,l} |\bar{x}_j, \bar{x}_l\rangle,$$

где $|\bar{x}_j\rangle$ и $|\bar{x}_l\rangle$ — координаты пули и мишени соответственно. Пара $|\bar{x}_j, \bar{x}_l\rangle$ есть базисное состояние объединенной системы. Унитарная эволюция такой системы, задаваемая уравнением Шредингера, содержит два оператора, действующих последовательно в каждый момент времени: оператор кинетической энергии $\left(-\frac{h^2}{2m}\Delta_{bul}\right) \bigotimes \left(-\frac{h^2}{2m}\Delta_{tar}\right)$, где операторы Лапласа Δ действуют независимо на каждую координату каждой из двух частиц, и оператор потенциальной энергии $V(\bar{x}_{bul}, \bar{x}_{tar})$, который действует на обе частицы одновременно.

Для представления квантовой эволюции методом коллективного поведения это означает, что действие оператора кинетической энергии должно обеспечиваться внутренним процессом в рое экземпляров, соответствующих пуле и мишени, в то время как действие оператора потенциальной энергии должно обеспечиваться взаимодействием только внутри отдельной выбранной пары экземпляров пули и мишени.

Если мы выбрали модель диффузионного роя, мы можем выбрать один экземпляр из одного роя, другой — из другого роя, и рассматривать взаимодействие только между этими двумя экземплярами, а также взаимодействие каждого из выбранных экземпляров с другими экземплярами своего роя. Затем надо выбрать своего партнера для каждого экземпляра мишени (таким образом все экземпляры двух роев будут разбиты на пары) и собрать статистику.

Таким образом, все взаимодействия между двумя реальными квантовыми частицами сводятся к взаимодействию внутри роев и взаимодействию внутри избранных пар из разных роев. Если у нас имеется незапутанное состояние вида $|\psi_1\rangle \bigotimes |\psi_2\rangle$, то пары надлежит выбирать произвольно; при запутанных состояниях это, вообще говоря, не так. Если L есть общее чис-

ло экземпляров в каждом рое, у нас есть L^2 возможных пар двух экземпляров. Для n реальных квантовых частиц мы будем иметь кортежи вида $a_1, a_2, \ldots, a_n$ их экземпляров вместо пар, как в случае двух частиц. При росте числа реальных частиц число всех кортежей растет как L^n, что отражает главную вычислительную проблему квантовой теории многих тел.

Итак, перед компьютерным моделированием многочастичной квантовой динамики встает следующая проблема: как выбрать «существенные» кортежи $a_1, a_2, \ldots, a_n$ экземпляров, которые собирают основную часть вероятности. Пусть $\mathcal{B}$ обозначает множество всех кортежей $a_1, a_2, \ldots, a_n$. Проблема селекции, таким образом, состоит в нахождении малого (не экспоненциально большого) подмножества $B \subset \mathcal{B}$, такого, что $\int\limits_B |\Psi(\bar{x})|^2 \, d\bar{x} > 1 - \epsilon$ для выбранной вероятности ошибки ϵ. Мы называем задачу нахождения такого подмножества B проблемой селекции состояний. Если значительная часть B состоит из запутанных состояний некоторого типа Z, проблему селекции можно назвать проблемой селекции состояний типа Z. Если для некоторого класса многочастичных квантовых эволюций для их состояний Z множество B можно построить некоторым эффективным алгоритмом, мы скажем, что для класса Z проблема селекции решается конструктивно. Здесь мы принимаем, что множество начальных состояний для эволюций из Z устроено просто (то есть может быть получено с помощью эффективного — полиномиального по времени — классического алгоритма).

Заметим, что проблема селекции состояний не обязательно имеет решение для любой разумной квантовой эволюции в полном гильбертовом пространстве. Например, она заведомо неразрешима для быстрых квантовых алгоритмов, которые характеризуются как раз тем, что амплитуда распределяется более или менее равномерно по экспоненциально большому числу базисных состояний.[22]

Быстрые квантовые алгоритмы — не единственный пример. Для оператора Уолша–Адамара $H^{\otimes n}$, где H есть матрица Адамара, имеет место

[22]Проблема селекции состояний актуальна также для энтузиастов квантового компьютинга. Ее решение устанавливает своеобразную верхнюю границу для сложности квантовых эволюций, которые можно эффективно моделировать на классическом компьютере. Эволюции, лежащие вне этой области, требуют применения квантового компьютера. Вплоть до нашего времени квантовые быстрые алгоритмы представляли собой довольно искусственные конструкции. Решая проблему селекции, мы можем пытаться найти более наглядные примеры быстрых квантовых эволюций, которые сами по себе могут быть использованы в качестве квантовых подпрограмм при моделировании квантовых систем. Такие квантовые подпрограммы должны искаться среди эволюций, которые не допускают конструктивную селекцию состояний.

распределение амплитуды именно такого типа, хотя этот оператор и не является запутывающим.[23]

Тем не менее, мы имеем основания ожидать, что для некоторых очень важных типов квантовой эволюции проблема селекции состояний решается конструктивно. Один из примеров — эволюции класса квантовых систем с лагранжианом квадратичной формы $L = \bar{a}\bar{x}^2 + \bar{b}\bar{x}\bar{x}_t + \bar{c}\,\bar{x}_t^2$ от координат и импульсов (например, система гармонических осцилляторов). В книге [19] доказано, что для таких систем все траектории, дающие значимый вклад в амплитуду, являются классическими, что немедленно дает нам эффективный метод селекции состояний, поскольку мы должны только проследить за состояниями в траекториях, генерируемых простым алгоритмом, описывающим классическое движение.

Опишем алгоритм применительно к нашей простой системе, состоящей из пули и мишени. На самом деле такое ограничение не существенно, и данный алгоритм очень просто переносится на системы из произвольного числа частиц. Мы стартуем с некоторого подмножества $B_0 \subset \mathcal{B}$, которое может быть получено случайным выбором партнера a, экземпляра мишени для каждого экземпляра пули b. Это множество B_0 представляет незапутанное состояние, которое у нас имеется в начальный момент времени. Мы имеем $B_0 = \{(a_1, b_1), (a_2, b_2), \ldots, (a_n, b_n)\}$.

Рассмотрим оператор эволюции, действующий на B_0 естественным образом:

$$B_0 \to B_1 = \tilde{B}_0 = \{(\tilde{a}_1, \tilde{b}_1), (\tilde{a}_2, \tilde{b}_2), \ldots, (\tilde{a}_n, \tilde{b}_n)\}.$$

Теперь мы сгруппируем все пары из B_1 в некоторое количество групп: $\Gamma_1, \Gamma_2, \ldots$, так что для любого $j = 1, 2, \ldots, s$ $\|a_j - \tilde{a}_j\| + \|b_j - \tilde{b}_j\| < \epsilon_0$ и $\|v(a_j) - v(\tilde{a}_j)\| + \|v(b_j) - v(\tilde{b}_j)\| < \epsilon_1$ для некоторого малого $\epsilon_0, \epsilon_1 > 0$, где $v(a)$ обозначает скорость экземпляра a. Другими словами, мы объединяем в одну группу пары экземпляров, имеющие близкое пространственное положение и близкие скорости соответствующих элементов пар.

Если рассматривать усредненные по некоторому времени скорости, можно было бы группировать только по положению, так как средние скорости у близких частиц будут примерно одинаковы. Мы можем рассматривать только экземпляры. принадлежащие к тонкому слою; для прочих из-за классического характера изменения скорости проблема селекции не будет актуальной. Если данные кортежи принадлежат тонкому слою и близки друг к другу, можно считать, что у них близки и скорости. Действительно, ес-

[23] Для отсечения таких очевидных случаев можно было бы модифицировать определение существенных кортежей, включив в него возможность случайного выбора его членов.

ли оказалось, что скорости не близки, в силу свойств тонкого слоя, эти кортежи либо быстро разойдутся в пространстве, либо какой-либо из них покинет тонкий слой.

Теперь из групп Γ_j m мы выберем несколько групп: $\Gamma_{j_1}, \Gamma_{j_2}, \ldots, \Gamma_{j_m}$, так что в каждой из них содержится более n_0 элементов, тогда как в любой из остальных групп содержится менее n_0 элементов, для некоторого $n_0 < n$. Назовем пары из избранных m групп избранными парами. Мы выбросим не избранные пары из рассмотрения. Общее число $\tilde{n}$ всех пар a_j, b_j теперь уменьшилось по сравнению с первоначальным числом пар n в множестве B_0. Этот этап селекции назовем выбраковкой.

Для того чтобы восстановить общее число пар, мы добавим $n - \tilde{n}$ новых пар $(\tilde{a}, \tilde{b})$ к числу избранных пар. Это можно сделать эффективно; канонический способ сделать это называется перекрестным обменом (кросс-овер). Перекрестный обмен означает, что мы генерируем новые пары из двух имеющихся путем обмена экземплярами соответствующих роев. То есть мы образуем пары $\tilde{a}_2, \tilde{b}_1$ и $\tilde{a}_1, \tilde{b}_2$ из пар $\tilde{a}_1, \tilde{b}_1$ и $\tilde{a}_2, \tilde{b}_2$. При этом первоначальные (родительские) пары выбираются случайным образом из равномерного распределения. Такая генерация новых пар происходит до тех пор, пока мы не достигнем первоначального числа пар n с точностью, быть может, до одной пары. Эта последовательность генераций новых состояний называется репликацией. Новый набор пар теперь будет отражать распределение вероятностей обнаружения реальной пары частиц более эффективно, чем исходный, так как мы произвели большее сосредоточение амплитуды на тех состояниях, вероятность которых была больше.

Итак, шаг селекции состоит из двух этапов: выбраковка и репликация.

Потом мы повторяем эту процедуру селекции многократно и находим последовательность

$$B_0, B_1, \ldots$$

множеств, состоящих из пар экземпляров, соответствующих нашим двум реальным частицам: пуле и мишени. На конце этой последовательности, который определяется временными рамками рассматриваемого процесса, мы имеем результирующее множество пар экземпляров, которое и дает нам приближение конечного квантового состояния.

Приведем главный довод в пользу того, что описанная процедура квантовой селекции состояний согласуется со стандартным квантовомеханическим описанием эволюции двух частиц. Для этого мы покажем, что избранные пары на каждом этапе несут превалирующую часть квантовой

вероятности для нашей двухчастичной системы по сравнению с парами, отброшенными на этапе выбраковки.

Действительно, для избранных k пар амплитуды, которые они несут в смысле фейнмановских интегралов по траекториям, близки по фазе и равны по абсолютной величине. Близость по фазе вытекает из нашего правила группировки по пространственной близости и формул (5.28). Как отмечено выше, близкие по пространственному положению экземпляры (тонкого слоя) системы будут также близки и по (средней) скорости. В рое вся интерференция — конструктивная, в отличие от вычисления волновой функции по одному из аналитических методов, например, как интеграл по путям. Поэтому результирующая вероятность обнаружить пару (пуля + мишень) в соответствующей пространственной позиции будет примерно

$$|\sum_{j=1}^{k} \frac{1}{n}| = \frac{k}{n},$$

благодаря почти конструктивной интерференции амплитуд, тогда как для того же числа пар, не являющихся близкими по положению и импульсам, эта вероятность будет около

$$|\sum_{j=1}^{k} \frac{\alpha_k}{n}| \approx \frac{\sqrt{k}}{n},$$

что гораздо меньше, чем $\frac{k}{n}$ для больших k. Это следует из того, что фазы, ассоциированные с экземплярами, распределены случайно для пар из разных групп. Итак, процесс селекции может дать хорошее приближение к стандартной квантовой эволюции, если число экземпляров велико.

В сущности, число всех экземпляров каждого из роев должно быть достаточно велико, чтобы распознать важные особенности квантового поведения реальной системы, вытекающего из всех фейнмановских траекторий, дающих заметный вклад в конечное состояние. Например, для эксперимента с прохождением объединенной частицы (пуля + мишень) через две щели число экземпляров должно быть достаточно для получения стандартной интерференционной картинки, и т. д.

Главное преимущество алгоритма селекции в том, что здесь нам нужно только первоначальное число экземпляров в каждом рое, которое зависит от числа частиц линейно, в то время как если бы мы описывали квантовую эволюцию согласно стандартному гильбертову формализму, нам бы понадобилось память, зависящая от числа реальных частиц экспоненциально.

За пределами нашего способа моделирования оказываются квантовые процессы, распределяющие амплитуду по очень большому числу состояний без ее заметной концентрации, поскольку само существование таких состояний противоречит тому варианту конструктивизма, который мы здесь рассматриваем, — представлению коллективного поведения. Квантовые запутанные состояния, получаемые в экспериментах типа GHZ и W, удовлетворяют условиям применимости процедуры селекции. Поэтому практическая селекция этих состояний в численных экспериментах должна быть нашей первой целью.

5.7.1. Эффективный алгоритм селекции состояний для n частиц

Мы покажем, как проблема селекции состояний может быть конструктивно решена для широкого класса квантовых эволюций систем из произвольного числа частиц. Этот класс фактически определяется тем, что при его моделировании вычислительный ресурс классического компьютера расходуется наиболее экономичным образом, соответствующим абсолютной модели декогерентности. Мы обобщим приведенную выше конструкцию на случай n реальных квантовых частиц и покажем, каким образом в ней сочетаются описание унитарной динамики и декогерентность.

При стандартном описании динамики волновой функцией серьезной проблемой является определение вида первоначальной волновой функции, поскольку от этого существенно зависит вид получаемого решения. В нашем случае мы должны позаботиться о том, чтобы выбор первоначальных кортежей (5.28) обеспечил бы наилучшее приближение волновой функции первоначального состояния. Однако при эволюции во времени наша модель может существенно разойтись с точным решением уравнения Шредингера или с точным решением унитарной задачи рассеяния из-за того, что в нашей модели автоматически учитывается декогерентность. Мы можем считать, что один экземпляр или один кортеж (в многочастичном случае) является носителем зерна амплитуды в описанном выше смысле, так что мы автоматически будем использовать абсолютную модель декогерентности. Выбор кортежей, таким образом, является главной задачей при определении динамики многочастичного роя.

Численные эксперименты по моделированию говорят о том, что выбор кортежей вряд ли можно оформить в виде одной простой процедуры. Я предлагаю для этой цели простой генетический алгоритм для нахождения кортежей, который использует последовательный повтор динамических сценариев, причем выбор начального состояния для каждого сценария будет использовать результат предыдущего сценария.

Мы будем описывать генетическое запутывание на примере рассеяния n квантовых частиц. Стартуем с незапутанного состояния этих частиц, в котором частица j имеет волновую функцию Ψ_j, или, в роевом представлении, рой S_j. В первом сценарии мы определим начальное состояние n частичного роя $\bar{S}_{ini}$ так, что кортежи $\bar{s}$ выраны случайно для равномерного распределения экземпляров внутри каждого одночастичного роя. После некоторого малого времени Δt эволюции роя мы находим его конечное состояние $\bar{S}_{fin}$. Если у нас есть достаточно большое первоначальное число N экземпляров в роях S_j, мы, повторив рассуждения, приведенные выше, получим приближение волновой функции через $\bar{S}_{fin}$, где конечное количество всех экземпляров служит фактором декогерентности. Проблема в том, чтобы использовать строго ограниченное число N экземпляров для моделирования реальной динамики с приемлемой точностью. Здесь под приемлемой точностью мы понимаем правильное определение продуктов реакции: для химических реакций это будет список возможных ее продуктов с соответствующими этим продуктам вероятностями их выхода, зависящими от начального состояния частиц.

С этим ограничением по N мы фактически нагружаем экземпляры двумя ролями: во-первых, симуляция квантовой унитарной динамики волновой функции, а во-вторых, (абсолютная) модель декогерентности, вытекающая из наличия зерна амплитуды. Заметим, что эти две роли не вполне согласуются друг с другом. Приближение волновой функции требует малого расстояния $\|\Psi_{Shoedinger} - \Psi_{swarm}\|$, тогда как декогерентность вытекает из того, что наличие зерна ведет к обнуливанию всех слагаемых в суперпозиции, у которых амплитуды по модулю меньше ϵ, что может дать большое расхождение с динамикой волновой функции при ее унитарной эволюции в случае большой дисперсии распределения амплитуд. Это неизбежно случается при большом числе n реальных частиц, за исключением особых случаев, при которых амплитуда каким-то образом концентрируется на малом числе слагаемых суперпозиции. В этих исключительных случаях мы будем наблюдать проявления квантовых эффектов в кусках вещества мезоскопических размеров. Подобные эффекты мы обсудим ниже; их описание было бы одной из вероятных областей наиболее простого применения нашего подхода.

Итак, мы должны выбрать кортежи $\bar{s}$ так, чтобы распределение экземпляров в них представляло бы наиболее точный вид унитарной динамики. Мы утверждаем, что возникающая при этом абсолютная декогерентность будет соответствовать тому, что наблюдается в реальных экспериментах. Это должно быть верным для элементарных рассеяний в течение малого промежутка времени Δt. Назовем R^{6n} двойным конфигурационным про-

странством для n частиц. Его смысл в том, что мы намереваемся рассматривать пару состояний: начальное и конечное. Для любого кортежа $\bar{s}_{ini}$ в начальном рое мы предполагаем, что однозначно определен кортеж $\bar{s}_{fin}$, который получается из $\bar{s}_{ini}$ в ходе эволюции данного роя.

Выберем разбиение двойного конфигурационного пространства для n частиц на клетки в виде кубиков и сгруппируем результирующие пары $(\bar{s}_{ini}, \bar{s}_{fin})$ кортежей в группы $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2, \ldots, \mathcal{G}_k$ так, что каждая группа состоит из всех пар, попавших в один и тот же кубик этого разбиения.

Занумеруем эти группы так, чтобы количество пар в этих группах не возрастало: $\mathcal{N}_1 \geqslant \mathcal{N}_2 \geqslant \ldots \geqslant \mathcal{N}_k$. Выберем первые $k_1 < k$ групп и назовем входящие в них пары правильными, все прочие пары объявим неправильными. Теперь мы можем найти начальное состояние для следующего сценария рассеяния. Мы исключаем неправильные пары из $\bar{S}$ и перегруппировываем входившие в них экземпляры частиц по-другому, в соответствии с правилами для генетических алгоритмов. Здесь было бы уместным применение таких генетических методов как «кросс-овер», при которых бывшие члены неправильных кортежей перегруппировываются так, чтобы максимально походить на правильные кортежи. Я не буду более подробно останавливаться здесь на этой теме. Предположим, что мы каким-то образом перегруппировали все неправильные кортежи так, что эта новая группировка дала нам новые кортежи, которые ближе к правильным, чем были те, что мы ранее объявили неправильными. Для так определенного начального состояния $\bar{S}_2$ второй версии сценария мы запустим снова процесс динамической диффузии, и т. д. В результате получится последовательность пар

$$(\bar{S}^1_{ini}, \bar{S}^1_{fin}), (\bar{S}^2_{ini}, \bar{S}^2_{fin}), \ldots, \tag{5.32}$$

где всякая пара $(\bar{S}^j_{ini}, \bar{S}^j_{fin})$ представляет результат репетиции с номером j.

Таким образом, процесс перехода от одной пары к следующей состоит из трех шагов:

- динамическая диффузия роя, основанная на градиентном действии плотности роя и перераспределении импульсов в тонком слое,
- отбор правильных пар, и
- репликация правильных пар из отбракованных элементов с помощью процедуры типа перекрестного обмена.

Градиентное действие плотности роя на тонкий слой, приводящее к перераспределению скоростей между экземплярами, принадлежащими пространственно близким, но различным кортежам, входящее в оператор динамической диффузии, является прямым аналогом мутаций в эволюционном

программировании. В терминах многомировой интерпретации квантовой теории кортеж является «миром», и оператор кинетической энергии представляет взаимодействие между различными «мирами». Цепь (5.32) должна обрываться тогда, когда число элементов в выбранных группах стабилизируется.

Описанный метод отбора состояний соответствует стандартной унитарной динамике для многих частиц. Обратимся к представлению этой динамики в виде фейнмановских интегралов по траекториям (см. [19]), где волновая функция Ψ в каждый момент времени t определяется следующим равенством:

$$\Psi(t,\bar{r}) = \int\limits_{R^{3n}} K(t,\bar{r},t_1,\bar{r}_1)\Psi(t_1,\bar{r}_1)d\bar{r}_1, \tag{5.33}$$

где K есть ядро нашей системы, которое (с точностью до множителя) можно представлять как амплитуду, которая переносится одним кортежем, если мы примем, что кортежи вместо своих скоростей, как в методе коллективного поведения, переносят амплитуды, выражаемые комплексными числами. Амплитуды K, переносимые кортежами, зависят, таким образом, от начальной и конечной позиции $\bar{r}_1$ и $\bar{r}$ кортежей, и потому должны быть близки для кортежей с близкими начальными и конечными пространственными положениями. Это справедливо, если $\|r-r_1\|$ мало и нет большого разнообразия траекторий, ведущих из точки 1 $(t_1,\bar{r}_1)$ в точку 2 $(t,\bar{r})$. Мы оценим вклад в вероятность $|\Psi(t,\bar{r})|^2$ двух множеств кортежей с l элементами в каждом: первое множество пусть содержится в одной группе $\mathcal{G}_j$, а кортежи из второго множества пусть имеют только близкие конечные положения, но далекие начальные, и пусть, для определенности, эти начальные положения будут выбраны случайным образом из равномерного распределения. Вклады этих двух множеств в вероятность будут приблизительно такими

$$d_1 = |\sum_{s=1}^{l}\alpha|^2 = k^2|\alpha|^2, \quad d_2 = |\sum_{s=1}^{l}\alpha e^{i\phi_s}|^2 \approx k|\alpha|^2,$$

где фазы ϕ_s распределены равномерно, как мы уже показали выше. Следовательно, вклад первого множества будет существенно преобладать. Возвращаясь к экземплярам из метода коллективного поведения, мы замечаем, что информацию, переносимую комплексными амплитудами, здесь передают скорости экземпляров, и вклад меньших групп $\mathcal{G}_j$ для $j > k_1$ в вероятность будет гораздо меньшим, чем вклад правильных кортежей, взятых в том же числе. Это и оправдывает введенную нами процедуру отбора.

5.8. Идентичность электронов с точки зрения коллективного поведения

Поскольку мы предполагаем, что с помощью метода коллективного поведения возможно заменить традиционный алгебраический аппарат квантовой теории, нам надо интерпретировать идентичность квантовых частиц одного типа. Она проявляется в симметрии или антисимметрии волновой функции коллектива таких частиц. Эти симметрийные свойства волновой функции должны быть интерпретированы в терминах роев. Мы рассмотрим систему из n электронов с одинаковыми спиновыми состояниями. Начнем со случая $n = 2$. Предположим, что электроны имеют одинаковое состояние спина, то есть волновая функция такой системы в стандартном формализме $\Psi(r_1, r_2)$, где r_1, r_2 — координаты первого и второго электронов, должна удовлетворять свойству антисимметричности $\Psi(r_1, r_2) = -\Psi(r_2, r_1)$. В случае n частиц, координаты которых мы обозначаем через $\bar{r} = (r_1, r_2, \ldots, r_n)$, это условие записывается как

$$\Psi(\bar{r}) = (-1)^{\sigma(\pi)}\Psi(\pi\bar{r}),$$

где $\sigma(\pi)$ обозначает четность перестановки π. Если под координатами частицы понимать набор пространственных и спиновых координат этой частицы, то антисимметричность надо понимать по полному набору координат.

Простейший способ генерации антисимметричных функций состоит в том, чтобы рассматривать детерминанты следующего вида

$$D(f_1, f_2, \ldots, f_n; r_1, r_2, \ldots, r_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \det \begin{pmatrix} f_1(r_1) & f_1(r_2) & \ldots & f_1(r_n) \\ f_2(r_1) & f_2(r_2) & \ldots & f_2(r_n) \\ & & \ldots & \\ f_n(r_1) & f_n(r_2) & \ldots & f_n(r_n) \end{pmatrix}, \tag{5.34}$$

где волновые функции f_j образуют ортонормированную систему. Любая антисимметричная волновая функция n переменных может быть представлена в виде ряда

$$\Psi = \sum_j^l \lambda_j D_j(\bar{f}_j; \bar{r}) \tag{5.35}$$

таких детерминантов при разных выборах системы одночастичных функций $\bar{f}^j$.

Требование антисимметричности волновой функции по полному набору координат (включая спиновые) является отражением принципа запрета Паули. Если потребовать антисимметричности в момент времени $t = 0$, то решение уравнения Шредингера, соответствующего этому начальному условию, будет антисимметричным и для любого следующего момента времени, что вытекает из общей формулы для этого решения $|\Psi(t)\rangle = \exp(-\frac{iHt}{h})|\Psi(0)\rangle$.

В стандартном формализме квантовой теории антисимметричность волновых функций для системы идентичных фермионов просто постулируется.

Мы покажем, как фермионные волновые функции можно представлять в формализме коллективного поведения. Сначала сделаем одно замечание. Предположим, что носители одночастичных волновых функций не пересекаются. Тогда роевое представление волновой функции n электронов будет эквивалентно представлению этой функции в виде одного детерминанта (5.34). Действительно, представим себе, что мы вычисляем энергию системы с данной волновой функцией по формуле

$$E_\Psi = \int_{\mathcal{R}} \Psi^*(\bar{r}) H \Psi(\bar{r}) d\bar{r}. \tag{5.36}$$

Тогда для любого кортежа значений переменных $\bar{r} = (r_1, r_2, \ldots, r_n)$ существует не более одного набора индексов $j_1, j_2, \ldots, j_n$, такого, что $f_{j_1}(r_1) f_{j_2}(r_2) \ldots f_{j_n}(r_n) \neq 0$, поскольку в противном случае носители этих волновых функций оказались бы пересекающимися. Далее, знак волновой функции при вычислении энергии по формуле (5.36) не играет никакой роли, так как он просто сокращается. Поэтому вычисление по формуле (5.36) в случае непересекающихся носителей может быть проделано так, что каждая частица представляется своим роем экземпляров.

Теперь покажем, что условие непересечения носителей одночастичных волновых функций всегда может быть удовлетворено надлежащим выбором зерна пространственного разрешения. Действительно, пусть носители одночастичных волновых функций f_j пересекаются. Тогда мы разобьем каждый из кубиков c^s — деления конфигурационного пространства для одной частицы на n меньших частей (если n есть степень восьмерки, это будут кубики, в противном случае это может быть, например, несколько кубиков и один многогранник, составленный из кубиков), которые обозначим через $c_1^s, c_2^s, \ldots, c_n^s$. Без ограничения общности мы можем потребовать,

чтобы носитель функции f_j в кубике c^s содержался бы в c_j^s для каждого $j = 1, 2, \ldots, n$. В роевых терминах это означает, что все экземпляры роя, соответствующего частице j, попавшие в кубик c^s, содержались бы в c_j^s. Если это условие не выполнено, мы всегда можем сдвинуть экземпляры каждой частицы на некоторое расстояние, меньшее ребра первоначальных кубиков, так чтобы это условие выполнилось. Такой сдвиг не вызовет никакого изменения волновой функции, при условии что мы считаем зерно пространственного разрешения равным ребру Δx кубиков первоначального разбиения. После такого малого сдвига положений экземпляров мы добьемся того, чтобы носители наших одночастичных волновых функций не пересекались.

Заметим, что условие непересечения носителей автоматически выполняется, если мы рассматриваем рои реальных однотипных частиц, взаимодействующих по закону Кулона. Действительно, кулоновский потенциал будет отталкивающим и сколь угодно большим в точке расположения каждого экземпляра. Поэтому ситуация, когда два экземпляра одного кортежа находятся в одной точке пространства, является практически невероятной.

Таким образом, рассмотрение одного детерминанта $D(\bar{f}; \bar{r})$ эквивалентно рассмотрению нашей системы однотипных квантовых частиц в терминах коллективного поведения при отсутствии запутанности. В этом случае, как мы видели выше, можно рассматривать просто набор кортежей, в которых экземпляры из разных роев объединяются случайным образом. Однако при взаимодействии состояние быстро становится запутанным. При этом волновая функция системы n однотипных частиц должна иметь вид (5.35). В роевых терминах это означает следующее. Если L — число всех экземпляров в рое, соответствующем одной частице j, мы разобьем это количество на l множеств $S_j^1, S_j^2, \ldots, S_j^l$, так что их общие числа элементов находятся в таком же соотношении, как и числа $|\lambda_j|^2$ из равенства (5.35). Теперь составим кортежи таким образом, что они будут делиться на типы $1, 2, \ldots, l$. При этом кортеж типа k будет составлен из экземпляров, попавших в множества $S_1^k, S_2^k, \ldots, S_n^k$, причем эти экземпляры из множеств S_j^k будут выбираться случайно. Это в точности соответствует правилу формирования кортежей для одного детерминанта, приведенному выше. Мы видим, что в методе коллективного поведения нет необходимости специально следить за выполнением принципа запрета Паули. Он выполнен для любых однотипных заряженных частиц в силу определения динамической диффузии. При этом построение кортежей по детерминантной записи происходит по простому правилу, которое обобщает случай однодетерминантного состояния (5.34).

Состояния, выражающиеся одним детерминантом вида (5.34), считаются не запутанными в фоковском пространстве чисел заполнения. При определенном нами соответствии метода коллективного поведения и гильбертова формализма, состояния, соответствующие (5.34) в роевом представлении, также будут не запутанными. То есть не запутанные состояния в гильбертовом и фоковском формализме переходят в один и тот же класс состояний в формализме метода коллективного поведения.

Таким образом, в методе коллективного поведения частицы всегда представляются своими роями экземпляров, которые объединены в кортежи, соответствующие квантовым «мирам». Поэтому идентичность однотипных частиц здесь является вопросом соглашения ради удобства хранения в памяти больших массивов таких частиц, и не более того. Идентичность однотипных частиц, таким образом, не является базисным принципом конструктивного варианта квантовой теории. Это означает возможность рассмотрения некоторых частиц, принадлежащих одному типу, различным образом. Мы вернемся к обсуждению данного вопроса в следующей главе.

5.9. Метод коллективного поведения для квантовой электродинамики

Универсальность формализма коллективного поведения требует переформулировки квантовой электродинамики на его языке. Этого пока не сделано. Для того чтобы это сделать, надо точно определить, каким именно образом следует представлять фундаментальный процесс КЭД. Этому посвящен данный параграф. В нем мы приведем доводы в пользу того, что требуемый перевод КЭД возможен с полным сохранением изложенной выше схемы коллективного поведения для многих квантовых частиц. Перевод КЭД на язык коллективного поведения должен сохранять главные интуитивные представления о ее процессах и интерпретировать известные особенности КЭД:

- представление о фотонах как о частицах, движущихся с максимальной скоростью,
- рассмотрение фотонов в импульсно-энергетическом базисе пространства состояний,
- правила вычисления вероятностей основного электродинамического процесса: взаимодействия заряженной частицы с фотоном, дающего уравнение Дирака для частицы в электромагнитном поле.

5.9.1. Роевое представление для заряженных частиц в электромагнитном поле

Роевое представление заряженных частиц, данное в предыдущем параграфе, полностью сохраняется. Фотоны должны представляться в виде специального множества $\mathcal{S} = \{\int_1, \int_2, \ldots, \int_l\}$ экземпляров фотона. Таким образом, фотоны не должны выделяться при представлении системы частиц как отдельные частицы, а входят в описание системы только в качестве экземпляров. Такие фотоны называются виртуальными и образуют объект, называемый в КЭД электромагнитным полем. Каждый экземпляр фотона $\int_j$ имеет координаты $\bar{r}_j$, время t_j, вектор импульса $\bar{p}_j$ и вектор поляризации $\bar{\epsilon}_j$.

Под реальным фотоном мы будем понимать не часть сигнатуры системы, а набор кортежей экземпляров заряженных частиц, представляющий квантовое состояние типа W, отобранное по правилам, специально формулируемым для данной большой системы. Эти правила должны формализовать понятие «щелчка фотодетектора» и не являются, таким образом, универсальными для всех систем. То есть понятие реального фотона — не универсальное, в отличие от понятия экземпляра, а зависит от конкретной рассматриваемой системы, частные особенности которой и определяют, какие именно будут в ней реальные фотоны.

Таким образом, в сигнатуру роевой версии КЭД входит электромагнитное поле, разделенное на экземпляры фотонов. Именно это поле и экземпляры фотонов являются, таким образом, фундаментальными объектами, а реальные фотоны такими объектами не являются. Реальные, то есть детектируемые как отдельные частицы, фотоны, определяются разбиением поля на кванты, которое, в свою очередь, зависит от рассматриваемой системы, включая детектор. Из этого следует, что вероятность обнаружения конкретного фотона в некоторой точке пространства-времени не имеет никакого смысла. Смысл имеет только вопрос о том, с какой вероятностью произойдет событие, которое характеризуется применительно к данной системе заряженных частиц и поля как «щелчок фотодетектора». Это событие не включает непосредственно экземпляры фотонов. Оно представляет собой появление состояния W-типа заряженных частиц, которое в данной системе интерпретируется как «щелчок», то есть вызывающее колебание воздуха, которое может услышать человек, если мы бы включили в модель и колеблющиеся молекулы воздуха, и человека. Определение общих критериев того, что надо считать «щелчком», является интересным вопросом, который нуждается в особом исследовании. Это возможно только после фактической реализации описываемых в этой книге моделей. Пока мы толь-

ко констатируем, что наличие «щелчка» существенным образом зависит от выбранной системы. Поэтому «фотоны», детектируемые некоторым типом устройств, не обязаны совпадать с «фотонами», детектируемыми другим типом устройств.

Однако экземпляры фотонов проявляют себя не только в виде щелчков фотодетектора, но и непосредственно влияя на динамику заряженных частиц через фундаментальное взаимодействие, роевое описание которого дается ниже. Это влияние дает уравнение Дирака для заряженной частицы в электромагнитном поле, которое является ансамблем экземпляров фотонов, а в классическом пределе – уравнения Максвелла и вытекающие из них законы классической электродинамики.

Кортежи в роевом представлении КЭД должны иметь вид

$$s^1_{j_1}, s^2_{j_2}, \ldots, s^n_{j_n}, \int_{k_1}, \int_{k_2}, \ldots, \int_{k_d}, \tag{5.37}$$

где $s^m_{j_m}$ — j_m-й экземпляр заряженной частицы m, $\int_{k_d}$ — d-й экземпляр фотона, то есть экземпляры частиц в кортежах сохраняют свою принадлежность к определенной частице, а экземпляры фотона — нет. Индивидуальность экземпляров всех типов сохраняется. Сохранение индивидуальности экземпляров позволяет, в принципе, при необходимости ввести понятие фотона как специальной квантовой частицы в сигнатуру роевого описания КЭД. Однако на этом пути сразу же встретится серьезная трудность, поскольку фотон перемещается с максимальной скоростью перемещения экземпляров роя. Поэтому для фотона, если мы его рассмотрим как квантовую частицу, будет невозможно описать интерференционную картину с помощью диффузионного механизма, как это делается для частицы с ненулевой массой.[24] Интерференция фотонов может быть описана только через их взаимодействие с заряженными частицами, и никак иначе. То есть фотон нельзя представлять как квантовую частицу; он возникает только при детектировании как специальное колебание заряженных частиц. Тем не менее, экземпляры фотона являются фундаментальными объектами, которые непосредственно влияют на динамику рассматриваемой системы и участву-

[24]Если, конечно, не вводить понятие эфира. Мы могли бы это сделать, считая, что ванна экземпляров эфира зависит от рассматриваемой системы заряженных частиц. Например, мы могли бы считать, что эта ванна в действительности является нитями, связывающими данные частицы. В рамках алгоритмического подхода это не вызывает проблем, поскольку такой эфир не имеет никакого физического смысла: например, он не будет вызывать торможение света, в силу того что время, потраченное на производство процедуры Iterate, является административным, а не физическим. Все это будет законным только при одном условии: такой прием должен дать эффективный моделирующий алгоритм. Такое представление фотонов, например, дает модель интерференции света на щелях, так же, как и для массивной частицы.

ют в процессе отбора многочастичных квантовых состояний. Это в точности соответствует тому способу представления обобщенных W-состояний, который описан выше.

В методе отбора квантовых состояний надо внести одно существенное добавление, которое касается экземпляров фотонов. Мы будем считать, что два экземпляра фотонов $\int_1$ и $\int_2$, близки, если их импульсы и энергии близки. То есть это соответствует тому, что фотоны рассматриваются в импульсно-энергетическом базисе. В остальном вся схема отбора квантовых состояний многих частиц и поля, основанная на группировке кортежей вида (5.37), полностью сохраняется. Такое дополнение нашей схемы для случая КЭД нельзя считать существенным. Скорость движения экземпляров фотонов огромна по сравнению со средней скоростью перемещения экземпляров заряженных частиц, и если использовать нашу старую схему, основанную на близости в координатно-временном смысле, то для фотонов надо было бы выбирать кубики пространства, значительно превосходящие те, что применяются для разбиения конфигурационных пространств для частиц с массой. Учитывая то, что массивные частицы почти не смещаются за время Δt, в течение которого происходит элементарный акт рассеяния, то есть смещаются только экземпляры фотонов, мы получаем, что такой метод группировки соответствует именно группировке по значениям импульсов.

5.9.2. Роевое описание фундаментальных процессов КЭД

Рассмотрим теперь роевое описание главного процесса КЭД: рождение-поглощение фотона заряженной частицей без спина. Амплитуда такого процесса, согласно [17], равна $\lambda = \sqrt{4\pi}ie(p_1 + p_2) \cdot \epsilon$ где e — заряд частицы, p_1, p_2 — импульс ее до и после рождения (поглощения) фотона, ϵ — вектор поляризации фотона.

Этот процесс происходит только при условии сохранения энергии-импульса: $p_1 = p_2 + q$, где q есть импульс фотона. Мы примем, что ось времени направлена так, как показано на рисунке при рождении фотона, и в противоположном направлении — при его поглощении. Это эквивалентно тому, что при рождении мы имеем $p_1 = p_2 + q$, а при поглощении $p_1 = p_2 - q$.

При роевом описании это правило вычисления амплитуд надо трактовать так. Всякий экземпляр заряженной частицы порождает экземпляр фотона при соблюдении закона сохранения энергии-импульса и с поляризацией, направленной вдоль вектора $p_1 + p_2$ с вероятностью $|\lambda|^2$.

Рассмотрим немного более сложный процесс взаимодействия двух движущихся зарядов с помощью обмена виртуальным фотоном. Одна заря-

женная частица испускает виртуальный фотон, который затем поглощается другой частицей.

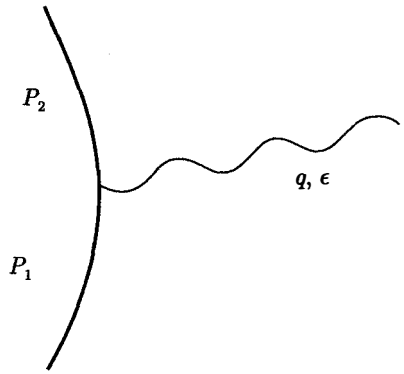


Рис. 5.1. Рождение (поглощение) фотона заряженной частицей

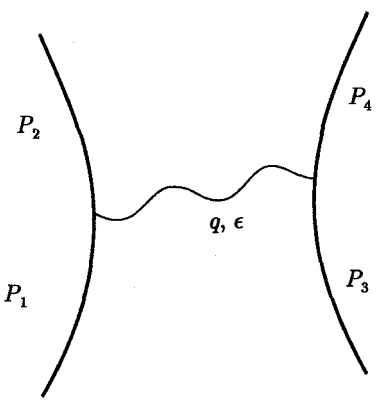


Рис. 5.2. Взаимодействие через обмен фотоном

Амплитуда такого процесса равна $\lambda_2 = (e\sqrt{4\pi})^2 \dfrac{(p_1+p_2)(p_3+p_4)}{q^2}$, и он происходит только при соблюдении закона сохранения энергии-импульса. Это происходит из-за того, что амплитуды в частях диаграммы должны перемножаться, а амплитуда свободного движения фотона равна $1/q^2$.

В роевом представлении этот процесс означает буквально то, что два экземпляра заряженных частиц обмениваются экземпляром фотона и веро-

ятность такого события равна $|\lambda_2|^2$. Заметим, что мы должны учитывать не только поперечные фотоны, у которых поляризация ϵ перпендикулярна вектору импульса, но и продольные фотоны, у которых поляризация ему параллельна (это то же самое, что вклад временных фотонов, у которых поляризация параллельна оси времени, поскольку для фотона координата, направленная вдоль его вектора импульса, с точностью до константы c есть время). Вклад фотонов второго типа даст кулоновское поле с мгновенным взаимодействием, а вклад поперечных фотонов — запаздывающий потенциал. Если кулоновское поле для наших экземпляров заряженных частиц учитывается как потенциал $1/r$, то мы должны рассматривать только экземпляры поперечных фотонов с выписанными вероятностями фундаментальных процессов. Если экземпляров фотонов достаточно много, такая модель должна давать нам уравнение Дирака, то есть в классическом пределе — уравнения Максвелла.

Теперь подробнее рассмотрим вопрос о том, как происходит объединение экземпляров частиц и фотонов в кортежи роевого формализма. Такие кортежи должны теперь иметь вид (5.37). Выше мы видели, что в системе координат типа пространство-время условием фундаментально взаимодействия является нахождение взаимодействующих частиц в одной точке пространства-времени, то есть у них должны совпасть пространственно-временные координаты. Это означает, что административное время у данных частиц будет одинаково в ходе всей реакции рассеяния, тогда как координаты должны изменяться в соответствии с их скоростями. Иными словами, мы можем сформулировать требование к кортежам роевого формализма КЭД:

В кортежах роевого формализма КЭД индивидуальные времена всех экземпляров должны отличаться не более чем на время $\Delta t = \Delta x/c$, где Δx есть расстояние между экземплярами в пространстве.

Таким образом, параметр индивидуального времени в экземплярах $s^1_{j_1}, s^2_{j_2}, \ldots, s^n_{j_n}, \int_{k_1}, \int_{k_2}, \ldots, \int_{k_d}$ должен быть одинаковым. Это означает, что взаимодействующие частицы существуют только в одном времени; если индивидуальное время у экземпляров различно, они не смогут взаимодействовать вообще. То есть кортежи КЭД имеют вид $\tilde{C}_1(t_1), \tilde{C}_2(t_2), \ldots$, так что каждому из них соответствует свое значение административного параметра времени.

Осталось показать, как выбираются импульсы p_1, p_2 в том случае, когда экземпляры либо стоят на месте, либо имеют максимальную возможную скорость. Для этого необходимо усреднять их импульс по времени, то есть сохранять историю каждого экземпляра по всем значениям административного времени: $t_1, t_2, \ldots$. Естественно, экземпляр, взятый в другой момент

времени, формально уже не является тем же. Поэтому мы должны ввести индивидуальные метки для каждого экземпляра так, чтобы при совпадении меток у разных экземпляров они считались бы одним и тем же экземпляром, но взятым в разные моменты административного времени. Если это — экземпляры фотона, то их координаты должны соответствовать его движению со скоростью света вдоль оси его импульса; если это — экземпляры заряженной частицы, должно быть аналогичное соответствие.

Теперь надо наложить на кортежи КЭД последнее естественное условие: сохранение индивидуальности самих кортежей. Это означает, что если у двух кортежей $\bar{C}_1$ и $\bar{C}_2$ есть экземпляры с одной индивидуальной меткой, то все их экземпляры имеют попарно совпадающие метки, то есть метки s_1^1 в обоих кортежах должны совпадать, метки s_2^2 в обоих кортежах должны совпадать, и т. д. То есть такие кортежи являются просто одним и тем же кортежем экземпляров, но взятым в разные времена административного времени.

Таким образом, в результате всего мы имеем такую картину. Кортежи КЭД можно сгруппировать на группы вида

$$\begin{array}{ll} \bar{C}_1(t_1), \bar{C}_2(t_1), \ldots, & \bar{C}_d(t_1), \\ \bar{C}_1(t_2), \bar{C}_2(t_2), \ldots, & \bar{C}_d(t_2), \\ \ldots, & \ldots, \\ \bar{C}_1(t_l), \bar{C}_2(t_l), \ldots, & \bar{C}_d(t_l), \end{array} \tag{5.38}$$

где C_j есть кортеж с постоянными членами, взятый в разные моменты времени, и элементы разных кортежей C_j не пересекаются (имеют разные индивидуальные метки).

Теперь мы можем усреднять импульс по времени для каждого экземпляра, и выражение для вероятностей фундаментальных процессов приобретает смысл. Отметим, что в течение всего административного промежутка времени, на котором происходит рассматриваемая реакция, надо выбрать только один момент испускания или поглощения фотона. Мы можем также рассмотреть процессы высших порядков, когда одновременно испускается или поглощается два, три или более экземпляров фотонов. Соответствующие вероятности также получаются из амплитуд этих процессов.

5.9.3. Процедура отбора квантовых многочастичных состояний с учетом фотонов

Теперь мы можем сформулировать процедуру отбора многочастичных состояний с учетом фотонов. Рой КЭД имеет у нас вид (5.38). Будем группировать кортежи этого роя в группы $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_1, \ldots, \mathcal{G}_z$. При этом в одну группу

попадут те и только те кортежи, которые вошли в одну клетку расширенного конфигурационного пространства, включающего в себя состояния всех рассматриваемых частиц и фотонов. В конфигурационном пространстве должно также быть измерение, соответствующее поляризации фотонов. Если мы хотим учесть еще и спины заряженных частиц, конфигурационное пространство должно содержать также измерения для всех участвующих спинов. Теперь мы можем применить описанную выше процедуру отбора многочастичных квантовых состояний с учетом КЭД. Административное время при этом будет вести себя как пространственная координата.

Резюмируя все вышесказанное, шаг эволюции состояний заряженных частиц и поля заключается в том, что мы совершаем преобразование нашего роя, соответствующее унитарному преобразованию, отвечающему данному фундаментальному взаимодействию, как указано выше, а затем применяем процедуру отбора. Последовательность

$$Q_1 \to Q_2 \to \ldots \to Q_k \tag{5.39}$$

таких шагов является моделью эволюции системы заряженных частиц и поля в методе коллективного поведения для частиц без спинов.

В случае частиц со спином их волновая функция будет зависеть также от спина. Это означает, что мы должны добавить к конфигурационному пространству спиновое измерение и переформулировать наш рецепт для этого случая.

5.9.4. О масштабируемости КЭД

Вопрос о масштабируемости КЭД относится к числу наиболее интересных вопросов квантовой теории. Вычислительные сложности, связанные с суммированием фейнмановских диаграмм, длительное время отодвигали этот вопрос на второй план, и надо сказать, что в настоящий момент он практически не изучен. Даже схема применения гипотетического квантового компьютера для анализа этой проблемы не разработана, в отличие от аналогичной схемы для обыкновенной квантовой механики (см. главу 5).

Тем не менее, проблема масштабируемости КЭД принципиальна. Ее решение необходимо для согласования квантовой теории с ОТО. Известно, что применение общей теории относительности в космологии требует ее продвижения в область действия квантовых систем. Это относится, например, к массивным объектам, типа черных дыр. Здесь мы непосредственно сталкиваемся с необходимостью применять методы квантовой электродинамики к очень большим объектам, то есть с проблемой масштабирования КЭД. Это тем более важно ввиду того, что теория ядерных взаимодействий

строится по образцу КЭД. Схема согласования КЭД и ОТО, если она будет создана, носила бы универсальный характер для космологии.

Предложенная в этой главе схема может помочь в решении этой серьезной открытой проблемы. С помощью формализма коллективного поведения мы можем больше узнать о той роли, которую играют фундаментальные взаимодействия в системах с очень большим числом частиц. Широко известно, что эта роль велика, например, в массивных телах или в высокоэнергетических процессах вроде космических взрывов, где перенормировка массы приобретает большое значение.

Мы видели, что процедура симуляции элементарного акта рассеяния с помощью процедуры отбора требует некоторого времени, которое, вообще говоря, является административным временем нашей модели. Если же мы рассматриваем последовательность актов рассеяния вида (5.39), то число таких актов будет реальным физическим временем. Можно было бы попытаться оценить долю административного времени при моделировании достаточно длительного процесса. Административное время фактически нужно исключить из физической длительности процесса. Для разных процессов доля административного времени, вообще говоря, является различной, то есть величина интервала изменения Δt административного времени различна для разного типа движений участвующих в нем частиц. Например, она должна быть относительно больше для движений с большими скоростями и ускорениями. Представим себе, что в очень большом ансамбле локальное административное время для некоторой частицы увеличилось. Правдоподобно допустить, что это должно привести к уменьшению физического времени для данной частицы по сравнению с другими. Если такое явление происходит с некоторой малой вероятностью со всеми частицами в большом ансамбле, это с необходимостью приведет к уменьшению реального физического времени для всего большого ансамбля. Разумеется, это — чистая спекуляция.

5.10. Связи между экземплярами

Мы ясно видели, что метод коллективного поведения дает нам некоторые новые возможности для исследований больших систем по сравнению с традиционным подходом, основанным на волновых функциях. Для продвижения метода коллективного поведения нам будет необходимо сформулировать эвристику, которая позволит применять этот метод к сложным задачам, что будет сделано в следующем параграфе. А сейчас мы определим очень важное понятие для такой эвристики: связи между экземплярами. Мы уже встречались с частным случаем связей — это кортежи, состоящие

из экземпляров различных элементарных частиц. Кортежи применялись нами для описания динамики в рамках гильбертова формализма, но они не обладали полной масштабированностью, так как, во-первых, рассматриваемые реальные частицы могут оказаться и неэлементарными, а во-вторых, все реальные частицы могут оказаться частью некоторой большой частицы, которая тоже должна рассматриваться как квантовая.

Рассмотрим снова атом водорода, состоящий из тяжелого протона и легкого электрона. Этот атом ведет себя как единая частица, у которой тоже есть свой рой и свои экземпляры. Например, атом может интерферировать при прохождении через две щели. Как в таком случае связаны экземпляры роя электрона, которые соответствуют разным экземплярам самого атома? Кортежная техника требует от нас, чтобы электрон был скрыт в том случае, когда мы рассматриваем атом как единое целое. Это работает, только если внутреннее состояние атома (состояние электрона в нем) не зависит от положения самого атома в пространстве! Но такая зависимость может иметь место, например, если мы посветим на атом лазером или если атом в квантовом состоянии приблизится к другому атому и надо будет рассматривать реакцию ассоциации между ними, которая требует изменения состояний электронов. В этом случае техника кортежей работает плохо и мы должны ее обобщить, введя понятие связей. Понятие связей будет полностью свободным от таких недостатков, и с его помощью метод коллективного поведения обретет полную масштабируемость.

5.10.1. Связи для одной реальной частицы

В методе коллективного поведения реальная частица представляется роем $\bar{s} = (s_1, s_2, \ldots, s_L)$ ее экземпляров. Выше мы видели, что интенсивность действия градиента плотности на тонкий слой, необходимая для приближенного представления решения уравнения Шредингера, пропорциональна δx^{-3}. Такой интенсивности можно добиться, если расположить экземпляры вдоль некоторой кривой γ в последовательности $s_1, s_2, \ldots, s_L$ и потребовать, чтобы воздействие экземпляров основной части роя на тонкий слой происходило только в пределах коротких участков этой цепочки, причем включать в тонкий слой ровно один экземпляр на пространственное зерно объема δx^3. Но можно попытаться добиться того же эффекта, рассматривая очень тонкую нить, независимо от величины зерна δx. Тогда при выборе значения δx мы получим, что изменение плотности роя в результате перехода одного экземпляра вдоль этой кривой γ будет обратно пропорционально величине элемента объема. Мы будем называть кривую γ нитью. Эту нить, соответствующую одной реальной частице, можно услов-

но представлять себе в виде веревки пренебрежимо малого веса, которая может быть свернута в клубок, но не запутана. Экземпляры этой частицы можно представлять себе как бусинки, нанизанные на веревку на примерно равных расстояниях друг от друга. Если веревка может сворачиваться в клубок, это позволяет сделать плотность реальной частицы сколь угодно большой в малом объеме пространства.

Представление роя в виде одной неизменной нити не всегда продуктивно. Рассмотрим, к примеру, один из основных экспериментов по квантовой механике: интерференция частицы при проходе через две щели. Если эта частица представлена одной нитью и эта нить только меняет свое положение в пространстве, мы не сможем получить интерференционный сгусток в середине между щелями. Этот сгусток можно получить, только если мы допустим, что нить, представляющая одну квантовую частицу, может разрываться на несколько частей и потом сразу же соединяться по-другому. Например, рассмотрим нить, налетающую на экран с двумя щелями (см. рисунок). Для получения сгустка между этими щелями за экраном необходимо предположить, что нить разрывается в двух точках так, что ее средняя часть оказывается изолированной, и затем сразу соединяется так, что эта средняя часть присоединяется к двум свободным концам, а ее бывшие края соединяются между собой так, что образуется кольцо. Тогда отталкивание между соседними экземплярами вдоль нити (взрыв пиков) даст нужную интерференционную картину.[25]

Представление одночастичного роя в виде нити может быть полезным для построения возможно более быстрых алгоритмов моделирования квантовой динамики.[26]

5.10.2. Связи для нескольких частиц. Упорядоченность квантовых «миров»

Теперь мы посмотрим, какие изменения надо сделать в нашей схеме, если частиц не одна, а несколько. Пусть у нас имеется n реальных частиц, которые мы нумеруем числами $1, 2, \ldots, n$, и каждую j-й частицу мы представляем в виде роя $s_1^j, s_2^j, \ldots, s_l^j$. Если мы отождествим каждую из реальных частиц j с одним из ее экземпляров $s_{k_j}^j$, то у нас получится кортеж $\bar{s}$ вида $s_{k_1}^1, s_{k_2}^2, \ldots, s_{k_n}^n$. Такой кортеж $\bar{s}$ мы называем квантовым

[25]Для сравнения приведен результат моделирования интерференции на 2 щелях методом собственных функций.

[26]Использование аналогии с нитью является вопросом удобства программной реализации, а не частью эвристики. Для одночастичных задач лучше использовать плотности, чем следить за поведением отдельных экземпляров.

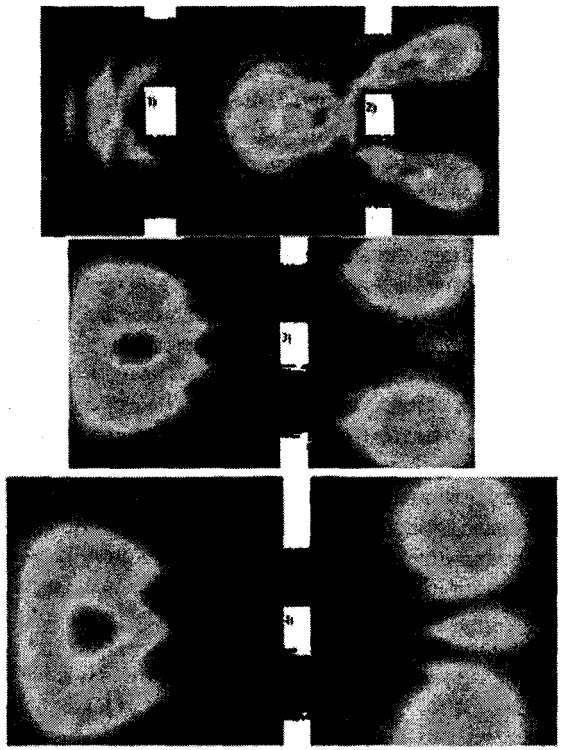


Рис. 5.3. Интерференция частицы на двух щелях: метод волновых функций (визуализация И. А. Семенихина, рисунок с сайта http://qi/cs/msu/su)

«миром». Выбор чисел k_j для $j = 1, 2, \ldots, n$ является отдельным вопросом; он очень важен, поскольку число таких выборов будет расти экспоненциально с ростом n, так что этот выбор должен быть с самого начала жестко ограничен. Самое простое (но не единственно возможное) ограничение — это потребовать, чтобы существовали числа $d_2, d_3, \ldots, d_n$, такие, что для любого $q = 2, 3, \ldots, n$ и для любого $k_1 = 1, 2, \ldots, l$ $k_q = k_1 + d_q$. Это означает, что всевозможные миры получаются только выбором очередных экземпляров друг за другом. Это правило мы назовем порядком связи.

Однако такая схема еще не является самой общей, так как мы жестко зафиксировали сами реальные частицы, экземпляры которых участвуют в собственных связях. Такая схема не может дать нам динамики связей,

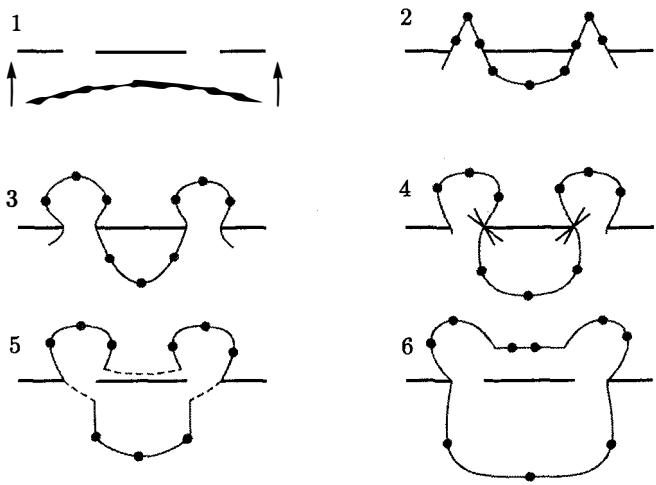


Рис. 5.4. Интерференция частицы на двух щелях: метод коллективного поведения

необходимой для моделирования того, что в стандартной квантовой механике принято называть процессом измерения: последовательное образование новых связей и одновременный разрыв старых. При таком процессе неизбежна ситуация, где разные экземпляры одной и той же реальной частицы образуют связи с экземплярами различных других реальных частиц.

Таким образом, мы приходим к более общему определению организации многочастичного роя в виде сети.

Связью между экземплярами s и s' будем называть некий объект, который ставится в соответствие этим двум экземплярам в модели. Будем называть такую связь связывающей эти два экземпляра. Если S есть множество всех экземпляров, под связью некое подмножество вида $S_c \subset S \times S$. Связь, которая связывает два экземпляра одной реальной частицы, мы назовем **нитью**, или несобственной связью. Другие связи называются собственными.

Определение 1. Сетью называется граф $\mathcal{N}$, вершины которого помечены разными экземплярами реальных частиц рассматриваемой системы, а ребра — связями. При этом требуется, чтобы максимальный связный подграф $G \subseteq \mathcal{N}$, все ребра которого являются нитями, охватывал все экземпляры одной реальной частицы. Такой подграф мы будем впредь называть роем для этой частицы. Путем по собственным связям называется последовательность вершин $v_1, v_2, \ldots v_k$ графа $\mathcal{N}$, в котором для любого $j = 1, 2, \ldots, k-1$ v_j и v_{j+1} соединены собственной связью.

Определение 2. Квантовым миром сети $\mathcal{N}$ называется максимальный подграф $M \subseteq \mathcal{N}$, такой, что он а) не содержит двух вершин, соединенных нитью, и б) для любой его вершины v любой путь по собственным связям, содержащий v, полностью содержится в M.[27]

Пример сети показан на рис. 5.6. Динамика сети определяется правилами перестроения. Одно из таких правил заключается в том, что перестроение наступает в случае, когда расстояние между экземплярами, соединенными связью (собственной или нитью), превзойдет некоторый критический предел Δ_{bound}. При этом Δ_{bound} зависит от типов экземпляров, а также от типа связи. Правила перестроения заключаются в следующем.

1) Если данная связь является нитью и при ее ликвидации нарушается связность роя для какой-то из частиц, то меньшая (по числу экземпляров) компонента роя объявляется фотонным роем, причем скорости экземпляров этих компонент перераспределяются таким образом, что разрушенная связность этого роя восстанавливается.

2) Если расстояние между двумя экземплярами разных реальных частиц становится меньше некоторого предела d_{bound}, то образуется новая собственная связь между этими экземплярами, при условии соблюдения сформулированного выше порядка связи.

Два таких правила могут служить основой метода рисования визуальной картинки динамики в том случае, если $d_{bound} \ll D_{bound}$. Это условие означает консерватизм собственных связей: разрыв образовавшейся связи требует выполнения некоторой работы, которая должна быть численно равна энергии испущенного в этом процессе фотона согласно правилу 1).[28]

Для сети «взрыв пичков» дает более содержательные возможности продолжения эволюции, по сравнению со случаем, когда у нас было ровно m кортежей экземпляров. Теперь возможна ситуация, когда «квантовый мир» не охватывает экземпляры всех реальных частиц, а только некоторых

[27]Если реальные частицы сильно различаются по массе, требование а) можно удалить, то есть допустить существование в одном мире разных экземпляров более легких частиц. Например, для задачи с двумя протонами и двумя электронами можно считать, что в одном мире есть несколько экземпляров электронов, что удобно для расчета межъядерного потенциала в одном мире. Если же оставить требование а), можно учесть очень слабый эффект запутывания между движениями ядер и электронов. В общем случае надо рассматривать целую иерархию сетей, в каждом шаге которой требование а) усиливается. Начальная сеть содержит только требование а) для самых тяжелых частиц.

[28]Мы можем представлять собственные связи как состоящие из клея, который прикрепляется к объекту на очень малом расстоянии, но способен сильно растягиваться до достижения точки разрыва. Нити же следует представлять как свернутые куски очень прочной веревки, концы которой закреплены клеем, так что при натяжении этой веревки она очень быстро перераспределяется в соответствии с ее положением, но не рвется. Разумеется, такое описание не является формальным и должно уточняться при рассмотрении конкретных эволюций.

из них. Соответственно ослабляется жесткое условие $m \gg s^n$. Например, при рассмотрении ассоциации молекулы мы можем включать в «квантовый мир» только экземпляры электронов, но не ядер; тогда получится, что мы учтем только запутанность между электронами. Здесь реальное значение n будет меньше числа всех реальных частиц в моделируемой системе, и потому понятие пика будет более содержательным, чем в случае, когда «квантовые миры» охватывали все реальные частицы.

5.11. Эвристика коллективного поведения

5.11.1. Краткое резюме

Итак, мы можем сформулировать эвристику коллективного поведения *в виде следующих тезисов.*

- Квантовое состояние каждой реальной частицы представляется в виде роя ее экземпляров.
- Квантовое состояние ансамбля из n реальных частиц есть набор S кортежей вида $\bar{s} = (s_1, s_2, \ldots, s_n)$, где для любого $j = 1, 2, \ldots, n$ s_j есть некоторый экземпляр j-ой частицы, причем различные кортежи не содержат общих экземпляров.

Метод, основанный на данной эвристике, есть конкретизация способа эволюции кортежей $\bar{s}$ во времени. Возможны различные методы, основанные на эвристике коллективного поведения. Например, можно использовать дискретную версию фейнмановских интегралов по путям. Метод интегралов по путям сохраняет базисное понятие стандартного формализма — волновую функцию, и потому наследует и его базисные недостатки, проявляющиеся, например, в том, что плотность экземпляров будет пропорциональна не $|\Psi|^2$, а $|\Psi|$, и мы, соответственно, теряем возможность получить новые пути масштабирования нашей модели по сравнению со стандартными численными методами, примененными к уравнению Шредингера.

Можно вообще отказаться *от использования комплексных чисел*, заменив их скоростями частиц, и тогда мы придем к методу динамической диффузии, описанному выше. Этот метод не содержит волновой функции вообще, и потому решительно расходится со стандартным формализмом. Здесь плотность роя будет пропорциональна $|\Psi|^2$ и у экземпляров будет длительная история. Это дает нам совершенно новую возможность масштабирования, основанную на понятии связей между экземплярами, которые объединяют их в кортежи.

Здесь возникает понятие тонкого слоя роя и добавляются правила эволюции роя.

- Плотность тонкого слоя мала и всюду одинакова. Его экземпляры тонкого слоя испытывают ускорение, пропорциональное градиенту плотности всего роя и обратно пропорциональное величине элементарного объема, и сразу передают свою скорость всем соседям равномерно.
- Потенциал взаимодействия реальных частиц действует на все экземпляры по закону Ньютона.
- Возникающие в результате свободного полета «разрывы» сглаживаются, а «пики» взрываются так, чтобы плотность роя стала вновь гладкой.

Вопрос о целесообразности введения других типов коллективного поведения, например, комбинации фейнмановского подхода с динамической диффузией, должен решаться в процессе моделирования многочастичных систем.

В дальнейшем мы будем под эвристикой коллективного поведения понимать ее реализацию в виде метода динамической диффузии, хотя все сказанное будет также справедливо и для общего типа такой эвристики.

5.12. Некоторые примеры

Цель конструктивизации квантовой теории — построение динамических моделей многочастичных систем. Аргументы, приведенные в предыдущих главах, а также опыт практического моделирования позволяет утверждать, что

Динамические модели невозможно построить только на законах квантовой теории. Для этого необходимы эвристики построения алгоритмов.

Можно ли достичь нашей цели, применяя одну идею для классических движений, а другую — для квантовых? Например, если действие меньше h, применяем уравнение Шредингера, если больше — метод классической динамики. Такой способ противоречит идеологии конструктивного математического анализа, так как предполагает точное знание действия частицы. Для конструктивизации квантовой теории необходим единый метод представления динамики на уровне той точности, которая доступна в модели в данный момент. Например, для коллективного поведения требуется совершенно детерминистический алгоритм определения динамики каждого экземпляра любой реальной частицы, состояние которой задано в модели с конечной точностью.

Блок-схема этого алгоритма и есть эвристика модели.[29] Наша эвристика основывается на методе коллективного поведения, но она не является единственно возможной. Кто-то может создать другую эвристику для конструктивизации квантовой физики, и это совершенно законная ситуация в свете принципиального плюрализма квантовой теории. Но надо помнить следующее: сравнение двух эвристик может осуществляться только через сравнение тех сценариев, которые дают моделирующие программы, построенные на их основе, и никак иначе. То есть бессмысленно обсуждать тот или иной элемент этих эвристик отдельно, например, пытаться придать некий «физический смысл» связям, приписывать им такие характеристики как массу, и т. д.

Динамическая эвристика — это конечный набор элементов для построения алгоритмов моделирования динамики.

В предыдущем параграфе мы фактически использовали эвристику отбора, то есть шаг модели по оси реального времени есть результат отбора по множеству шагов в административном времени, который определяется сравнением числа элементов в группах G_j. Эвристика отбора общепринята в квантовой теории и описана в канонических руководствах. Ее формальным выражением является метод интегралов по траекториям. По существу, эвристика отбора — единственно возможная в стандартной квантовой теории. Она хорошо согласуется с вероятностным духом этой науки и может успешно работать, например, для описания химических реакций с двумя-тремя атомами.

Но это достоинство близости к стандартному языку имеет и оборотную сторону, так как переносит на эвристику отбора главный изъян стандартной квантовой теории — ее непреодолимый сложностной барьер. Когда число частиц растет, для эффективного отбора требуется экспоненциально большое число экземпляров каждой реальной частицы, и мы снова оказываемся отброшенными к исходному пункту — подход, основанный только на отборе, не будет масштабироваться на большие системы.

Для хорошей работы отбора на больших квантовых ансамблях необходимо ликвидировать потери вычислительных ресурсов в методе отбора. То есть надо существенно ограничить отбор кортежей, так как именно здесь кроется главный канал утечки времени моделирования. Мы видели, что сохранение индивидуальности экземпляров представляет собой основной способ экономии в случае уравнения Шредингера для одной частицы, где такая индивидуальность помогла нам уйти от непроизводительного метода матричной алгебры. Именно эта идея индивидуальности экземпляров по-

[29]Этот термин понимается нами более точно, чем обычно, в том смысле, что от эвристики мы требуем определенности; это диктуется особой ролью алгоритмов.

может нам и в общем случае — для многочастичной квантовой эвристики. Мы должны задать совершенно конкретные правила для каждого экземпляра, описывающие его пошаговые состояния в любой момент времени. При отборе этого нет: экземпляры, попавшие в кортежи малых по численности групп, должны перераспределяться по новым группам. При таком переформировании кортежей нет никакой гарантии, что вновь сформированные кортежи также не попадут в группы с малым числом экземпляров, и эта ситуация закрепится в дальнейшем. То есть метод отбора допускает наличие «неперспективных» экземпляров, которые всегда будут оказываться в кортежах, подлежащих выбраковке. Такие «неперспективные» экземпляры должны быть заменены на новые экземпляры, состояния которых близки к «перспективным» экземплярам, попавшим ранее в кортежи, принадлежащие группам с большой численностью.

При такой процедуре замены «неперспективных» экземпляров полностью теряется всякая информация об их прошлой истории, в то время как эта информация может оказаться очень полезной для всего роя. Сохранение этой информации — достоинство метода динамической диффузии; оно проявляется через сохранение памяти о скорости каждого экземпляра. Мы можем явно указать на явный механизм возврата в рой «неперспективных» экземпляров участвующих частиц, и этот механизм будет связан с излучением экземпляров фотонов при ускорении экземпляров заряженных частиц. Замена «неперспективных» экземпляров представляет собой группировку роя, находящегося в состоянии, близком к разрыву на несколько компонент связности. Идея состоит в следующем. Будем представлять рой экземпляров электрона в виде упругой нити, на которую нанизаны эти экземпляры. В тот момент, когда нить чрезмерно растягивается (что соответствует большому расстоянию между соседними экземплярами), должен происходить ее разрыв. Критерием наступления такого момента является недостаток экземпляров для пополнения тонкого слоя, при условии что в данной области все экземпляры роя уже включены в тонкий слой. В этом случае экземпляры фотонов, излученные близкими к точке разрыва экземплярами частицы, должны своей отдачей сгладить напряжение в окрестности точки напряжения нити. Точки напряжения тогда могут возникнуть в других местах, где тоже будут излучены экземпляры фотонов, и т. д. Таким образом, эмиссия экземпляров фотонов будет механизмом, обеспечивающим целость роя и, соответственно, даст явный механизм перераспределения «неперспективных» экземпляров.

Щелчок детектора фотонов, сигнализирующий о его срабатывании, не обязательно происходит при поглощении какого-то экземпляра реального фотона экземпляром частицы, входящей в один из огромного числа корте-

жей, находящихся внутри фотодетектора. Событие, составляющее щелчок, является колебанием экземпляров реальных атомов в фотодетекторе, и оно наступает, с большой вероятностью, при абсорбции многих экземпляров фотона. Этот процесс обратен эмиссии и также происходит при утончении тонкого слоя роя экземпляров электрона, но в данном случае оно связано с действием внешнего потенциала. Тогда недостаток экземпляров в тонком слое восполняется за счет экземпляров поглощенного фотона. Однако если щелчок и не произошел, можно говорить о возможности объединения в кортеж экземпляров частиц, испустивших этот экземпляр фотона, и тех экземпляров частиц фотодетектора, среди которых находится поглотивший его экземпляр. Иными словами, образование нити между объектом эмиссии и детектором не обязательно сопровождается щелчком детектора. Такая нить, тем не менее, является вполне реальным объектом административной части модели, который в состоянии влиять, например, на детектирование следующих экземпляров фотонов.

Сформулированная выше процедура эмиссии экземпляра фотона при напряжении нити роя электрона годится только для свободного электрона. Если экземпляры электрона объединены в кортежи с экземплярами других частиц, все в принципе сохраняется, но надо обобщить понятие «напряжение нити» — его роль должно играть «напряжение сети», в которую помимо нитей, связывающих экземпляры электрона, входят также и собственные связи, связывающие экземпляры в кортежах. Эти кортежные связи являются значительно более слабыми, чем нити, связывающие экземпляры одной частицы (экземплярные нити). Критическое напряжение кортежной связи, вызывающее ее разрыв (распад кортежа), на несколько порядков меньше, чем для экземплярной нити. Это обеспечивает стабильность элементарных частиц в электродинамике.

Теперь мы готовы к тому, чтобы сформулировать эвристику метода коллективного поведения, пригодную для создания алгоритмов моделирования динамики. Она должна обладать полным масштабированием в следующем смысле. Содержащихся в ней элементов будет достаточно для построения моделей любой сложности: как добавление новых частиц в систему, так и структурирование частиц, считавшихся элементарными, будут иметь точные описания в терминах данной эвристики.

Этих элементов три:

- действие потенциала (или плотности роя) на экземпляры (или экземпляры из тонкого слоя),
- правила превращений и
- консерватизм связей.

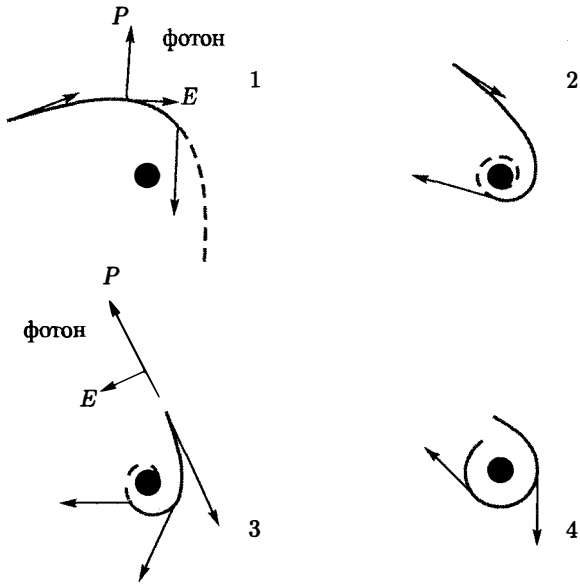


Рис. 5.5. Падение электрона на протон. Электрон представлен красной нитью. Пунктиром показано, как двигалась бы нить, если бы не было эмиссии фотона. На шаге 1) эмиссия тормозит электрон, на шаге 3) ускоряет, не давая упасть на протон. Вектор поляризации экземпляра фотона параллелен касательной к нити в той точке, в которой в результате его эмиссии меняется траектория нити

Действие потенциала на основную часть роя можно описать в терминах эмиссии-абсорбции фотонов. Динамика тонкого слоя является локальной и может вводиться в модель непосредственно, хотя более глубокие механизмы этой динамики могут служить предметом дальнейших исследований.

Правила превращений говорит о том, что должно получиться в результате столкновений, например, фотона с заряженной частицей.

Консерватизм связей является центральным моментом эвристики. Он означает, что связь сохраняется в точности до тех пор, пока расстояние между экземплярами не превысит некоторого порога δ_0, зависящего от типа частицы. После превышения порога δ_0 происходит превращение, описанное в пункте 2. Состояние роя после превращения должно восстанавливать имевшиеся связи. Дальнейшая эволюция может опять привести к превышению порога δ_0, и описанный сюжет повторится снова, и т. д.

Рассмотрим процесс ассоциации свободного электрона с протоном в рамках описанной эвристики. Мы не будем различать стационарных состояний как в дискретном, так и в непрерывном спектре, а будем заниматься только проблемой ассоциации — образуется атом водорода или электрон пролетит мимо. Соответственно, мы предположим, что излучается только один фотон. В реальности излучается несколько фотонов, и электрон оказывается ассоциированным в различных стационарных состояниях в окрестности протона. Все эти детали определяются начальным состоянием электрона и протона, которых мы не можем знать даже в принципе, с мы должны заменять это незнание генерацией случайностей. Но сейчас мы опишем именно эвристику, которую можно детализировать, в предположении, что излучается ровно один фотон и ассоциация происходит всегда в одно стационарное состояние.

Пусть связи между экземплярами электрона определяются их соседством в векторе $\bar{s}$. Множество таких связей геометрически представляет собой нити, на которые нанизаны экземпляры электрона. Каждый экземпляр электрона объединен в кортеж с неким экземпляром протона, согласно упорядочению вектора роя. Мы будем явно рассматривать только тонкий слой роя данной системы, а кулоновский потенциал представлять как фактор, вызывающий его напряжение. Шаг эволюции представляет собой три действия:

- взрыв пиков плотности роя экземпляров (модель оператора кинетической энергии),
- изменение импульса каждого экземпляра под действием кулоновского поля соответствующего ему экземпляра протона,
- свободное движение всех экземпляров.

При движении такой нити в кулоновском поле протона тот ее конец, который распложен ближе к протону, будет перемещаться с большей скоростью. Эта скорость быстро даст уменьшение плотности на противоположном конце, который находится дальше от протона. С другой стороны, такое же разряжение получится вблизи протона, где скорость будет сильно возрастать. Мы видим, что в общем случае нить экземпляров электрона является системой с отрицательной обратной связью, то есть дисбаланс скоростей будет нарастать, что приведет к превышению порога расстояния δ_0 между ее экземплярами. В этот момент возникают две возможности:

- часть экземпляров электрона, расположенная дальше от протона, должна быть объявлена экземплярами фотона, излученного данным электроном, или

- часть экземпляров электрона, расположенная ближе к протону, должна быть объявлена экземплярами фотона, излученного данным электроном.

В первом случае ближняя к протону часть нити должна оказаться на стационарной орбите и у нас получится ассоциация в атом водорода. Во втором случае фотон будет излучен в сторону протона и электрон улетит от протона.

Излученный фотон считается реальным, если его экземпляры излучены всеми экземплярами электрона. Таким образом, в обоих случаях будет излучен фотон, и вся разница между ними в том, какой у него будет импульс. То есть наша эвристика должна описывать метод получения импульса фотона по начальному состоянию электрона и протона. Снова огрубляя ситуацию, мы будем считать, что импульс излученного фотона направлен либо от электрона к протону, либо в противоположном направлении, и имеет одну и ту же абсолютную величину. В последнем случае ассоциация атома происходит, во втором — электрон и протон разлетаются. Таким образом, модель должна выбрать преобладающий тип кортежей:

- $s_1^{electron}$, s_2^{proton}, s_{assoc}^{photon} или
- $s_1^{electron}$, s_2^{proton}, s_{dissoc}^{photon}.

Такой выбор в большей степени обусловлен выбором первоначального кортежа, чем для ситуации, где фотона не было вообще. Действительно, у нас всегда есть некоторый допуск в значениях координат экземпляров всех частиц и их скоростей. Предположим, что точность определения координаты и скорости каждого экземпляра есть δ. Это значит, что мы производим округление всех величин до целых кратных δ. Пусть экземпляры фотона, определяющие, произойдет ассоциация или нет, — s_{assoc}^{photon} или s_{dissoc}^{photon} — различаются не более чем на δ. Выбор первого кортежа означает выбор такого приближения для одного из экземпляров фотона. Конфигурационное пространство в случае только протона и электрона будет содержать $L^{2\cdot3}$ элементов, где L — число делений на одной оси размерности. В случае же присутствия фотона у нас будет $L^{3\cdot3}$ элементов. Если мы рассмотрим ситуацию с поглощением и переизлучением этого фотона, размерность возрастет настолько, что станет возможным рассматривать даже с очень грубой точностью только малое число элементов кортежа. Иными словами, прибавляя к нашей системе несколько дополнительных частиц и соответственно удлиняя кортежи, мы получаем возможность, меняя значения координат фотонных экземпляров в пределах точности, получить тот же результат, что и при отборе запутанных состояний по методу из эвристики отбора.

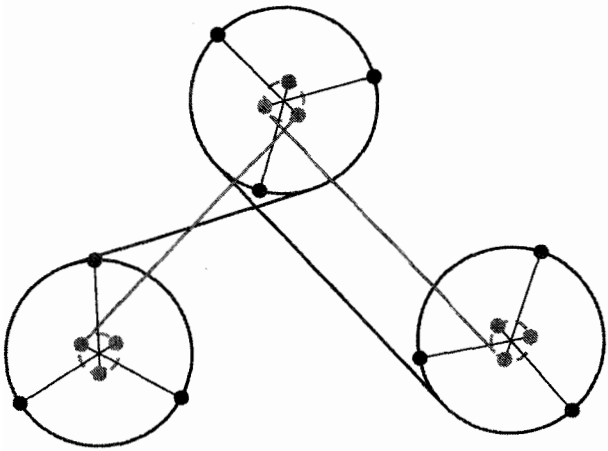


Рис. 5.6. Сеть для атома водорода. Связи между экземплярами электрона и протона (условное изображение результатов воображаемого пошагового моделирования)

5.13. Собственные векторы оператора эволюции и измерение

Нашим основным объектом изучения являются динамические сценарии. В то же время в стандартном формализме основной и наиболее эффективный прием — диагонализация операторов эволюции. Несмотря на то, что описываемые нами методы существенно расходятся со стандартной техникой унитарных операторов, в смысле точных значений состояний, мы можем все-таки что-то сказать о соответствии помимо того, что наш метод является приближением точного решения уравнения Шредингера при неограниченном увеличении числа экземпляров.

Допустим, что оператор временной эволюции $U = e^{-iHt/h}$ имеет набор собственных векторов $|\Phi_1\rangle, |\Phi_2\rangle, \ldots, |\Psi_N\rangle$. Тогда для состояния системы $|\Psi(t)\rangle$ в момент времени t мы имеем $|\Psi(t)\rangle = \sum_j \lambda_j e^{-iE_j t/h} |\Phi_j\rangle$, где E_j есть собственное число H, соответствующее $|\Phi_j\rangle$. Таким образом, зная состояние в исходный момент $|\Psi(0)\rangle$ и набор собственных векторов, мы можем очень просто узнать и состояние в любой другой момент: для этого надо просто вычислить экспоненты и произвести простые действия. Знание собственных векторов оператора эволюции означает, таким образом, что мы обладаем полной информацией о его действии на всех векторах состояния.

Что означает собственный вектор оператора эволюции с точки зрения динамического сценария? Это — сценарий, состоящий из ровно одного состояния. Дальнейшая конкретизация имеет нетривиальный смысл, только если мы ограничим число экземпляров частиц некоторой константой, например, числом 2. Тогда отталкивание между ближними экземплярами сведется просто к обмену между двумя экземплярами, как в примере электрона в кулоновском поле ядра. Для того чтобы еще более огрубить задачу, представим себе, что есть только два положения каждой частицы: $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Тогда если мы рассмотрим орбиту любого экземпляра, она будет содержать только 2 элемента: состояние $|0\rangle$ и состояние $|1\rangle$. Состояние вида $a|0\rangle + b|1\rangle$ можно тогда представлять как такое движение экземпляра между двумя состояниями, при котором он находится в $|0\rangle$ время, пропорциональное $|a|^2$, а в $|1\rangle$ — время, пропорциональное $|b|^2$, в соответствии с правилом Борна.

Тогда сценарий, состоящий ровно из одного состояния, можно получить так. Возьмем частицу в состоянии $|0\rangle$ и заставим ее эволюционировать согласно данному оператору U. Собственное состояние получится в результате стабилизации прыжков этой частицы при последовательном применении U. Например, если $U = \sigma_x$, мы получим стабилизацию на состоянии $|0\rangle + |1\rangle$. При этом наша частица рассматривается как только один экземпляр. А если мы представим ее в виде двух экземпляров, у нас появится еще отталкивание между ними, когда они близко, поэтому стабилизация произойдет на состоянии $|0\rangle - |1\rangle$. Первое состояние соответствует значению энергии 0, а второе πh, то есть первое будет основным, а второе возбужденным.

Если мы попробуем применить такой прием к нескольким частицам, мы получим еще более грубую картину поиска собственных функций, состоящую из прыжков кортежа из нулей и единиц из очередного базисного состояния в следующее. Поскольку эта картина сильно огрубляет реальность на каждом шаге, если мы перейдем к динамическому описанию экземпляров с помощью координат и скоростей, у нас будет нарушаться закон сохранения энергии. Это сигнализирует о том, что надо вводить в рассмотрение новые реальные частицы, удлиняя тем самым наши кортежи: как правило, это будут фотоны, вылетающие при электромагнитных взаимодействиях и поглощаемые системой, а также и новые заряженные частицы, испускающие или поглощающие их.[30] Это еще более огрубит картину, то есть вызовет еще большее отступление от унитарной эволюции. Если мы теперь будем выделять из такого растущего ансамбля нашу основную маленькую систему, то соответствующая ей часть кортежей будет

[30] Испускание и поглощение фотонов оказывается связанным с дискретностью нашей модели, то есть с конечностью числа экземпляров!

испытывать случайное воздействие со стороны остальных частей, относящихся к вновь принятым частицам. Это и есть ситуация измерения системы, при котором она попадает в одно из собственных состояний H. Если совсем не учитывать скорости (считая их полностью случайными), мы получим метод Монте-Карло, который сойдется к основному состоянию, для получения же возбужденных надо точнее учитывать скорости экземпляров.

Пусть $\bar{s}$ — кортеж экземпляров частиц рассматриваемой малой системы, $\bar{S}$ — кортеж экземпляров частиц большой системы, которую мы условно считаем неким «измерителем» для рассматриваемой. Если малая система изолирована, в модели есть вычислительный ресурс для представления различных типов движения экземпляров внутри $\bar{s}$, что соответствует потенциальной зависимости амплитуд от времени: $\lambda_j e^{-iE_j t/h}$. Если же произошло взаимодействие малой и большой систем, при котором кортежи объединились в общий большой кортеж $\bar{\mathcal{S}} = (\bar{s}, \bar{S})$, ресурса хватит только на представление одного типа движения малого кортежа, при котором зависимости от времени не будет, — это и есть переход малой системы в стационарное состояние, то есть то, что в стандартной форме квантовой механики называется измерением.

Мы видим, что измерение в эвристике коллективного поведения представляется как результат ограниченности вычислительных ресурсов модели. Оно происходит с состоянием малой системы автоматически, как только в рассмотрение включается большое число новых частиц. Конструктивизм, таким образом, не предполагает присутствия никакого специального наблюдателя, как в стандартном формализме.

5.14. Изменение сети во времени

Итак, модель многочастичной системы, основанная на методе коллективного поведения, представляет собой сеть, состоящую из экземпляров реальных частиц, и связей между ними. Мы будем представлять такую сеть в виде графа, вершинами которого являются экземпляры, а ребрами — связи. Те связи, которые соединяют разные экземпляры одной и той же реальной частицы, мы назвали нитями, а связи между экземплярами разных реальных частиц — собственными связями.

Если мы рассмотрим подграф, все вершины которого связаны нитями, вершины этого подграфа являются роем, соответствующим одной реальной частице. Если рассмотреть подграф, все вершины которого связаны собственными связями, такой подграф является квантовым «миром».

Эволюцию сети во времени в условиях ограниченности числа экземпляров всех частиц мы описываем последовательным выполнением процедуры Iterate, которая будет состоять из трех частей:

- взрывы пиков (аналог динамического сглаживания для одной частицы);
- классическое изменение скоростей (действие внешнего потенциала);
- селекция квантовых состояний (аналог свободного полета, генерирующего пики).

Это полностью соответствует сформулированной ранее схеме, с той лишь разницей, что роль основной части роя играет классическое описание частиц; переданный тонким слоем импульс при этом обрабатывается в первом пункте. Здесь вся специфически квантовая часть динамики сосредоточена в обработке пиков.

Фиксация понятия реальной частицы означает выбор типа взаимодействия, которое мы собираемся рассматривать. Например, если мы выбираем электроны и атомные ядра, то мы собираемся рассматривать электромагнитные взаимодействия. Эволюция сети во времени происходит по шагам и может быть представлена в виде цепочки S состояний этой сети, называемой сценарием:

$$S: \ N_1 \to N_2 \to \ldots \to N_l. \tag{5.40}$$

Динамическая модель эволюции D является набором таких сценариев: $D = \{S_1, S_2, \ldots S_h\}$. Модель D является предметом эвристики селекции. Это значит, что мы можем применять к разным сценариям методы группировок, мутаций, выбраковки, — то есть генетических вычислительных методов. Шаги вида $N_j \to N_{j+1}$ мы будем подразделять на два типа: простая эволюция и перестройка. В первом случае набор реальных частиц не меняется. Это означает, что сеть эволюционирует по описанным в предыдущем параграфе правилам: происходит свободный полет всех частиц, испускание или поглощение экземпляров фотонов. При этом нити переходят сами в себя, то есть частицы не могут превращаться друг в друга (испускание или поглощение фотона не в счет). При эволюции меняются только собственные связи, что означает распад запутанных квантовых состояний и образование новых запутанных состояний. Перестройка означает изменение реальных частиц: например, слияние двух протонов с образованием ядра гелия и фотона. При перестройке меняются нити. Например, слияние двух протонов означает, что вместо двух нитей получается одна — но соответствующая ядру гелия. Для перестройки существует точный количественный критерий: например, мы будем считать, что она происходит тогда и только тогда,

когда расстояние между соседними экземплярами в одной нити превысит некоторый порог $\Delta_{rebuild}$. Казалось бы, установление точного порога противоречит принципу конструктивного математического анализа. Но это — мнимое противоречие. Реальная эволюция получается после генетической процедуры отбора над сценариями, входящими в одну модель. В таких сценариях начальные параметры (состояния частиц в начальный момент) распределены случайно, и потому точность выбора $\Delta_{rebuild}$ нивелируется этим усреднением; мы всегда можем, уточняя результирующий сценарий, взять меньшее зерно пространственного разрешения, выбрать новые рои, как это указано выше, и рассмотреть новую модель динамики с новыми, более точными сценариями, то есть всегда можно выбрать большую точность приближения реального сценария, что и требуется в конструктивизме. При больших ускорениях тонкого слоя, характерных, прежде всего, для «взрывов пиков», вероятность перестройки возрастет.[31]

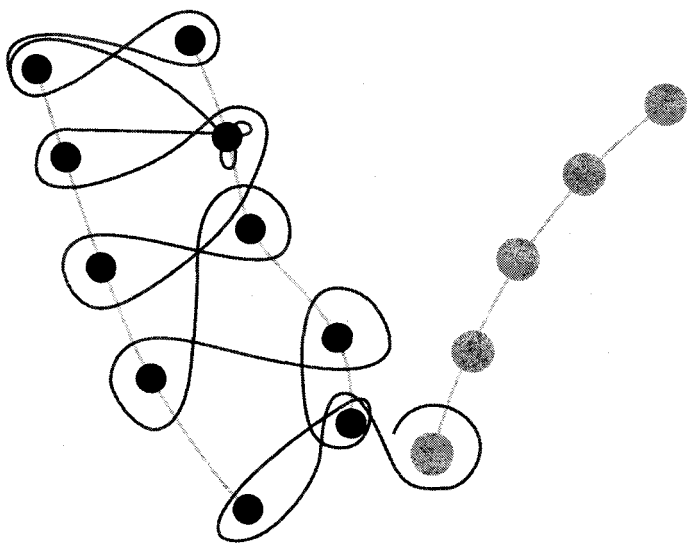


Рис. 5.7. Динамика сети в реакции $H_2 + O \rightarrow H_2O$ (показана нить одного электрона)

Покажем, как наша эвристика для изменения сети выглядит при простейшем распаде квантового состояния, вызванном декогерентностью. Мы рассмотрим, для определенности, электрон, находящийся в основном со-

[31] Было бы интересно проследить, до какой степени роевая динамика со «взрывами пиков» способна служить моделью превращения реальных частиц.

стоянии в поле двух кулоновских центров (например, молекулярный ион водорода), расстояние между которыми увеличивается с течением времени. Будем представлять нить, соответствующую электрону, в виде кольца. Это совершенно безразлично в смысле соответствия уравнению Шредингера, но удобно тогда, когда речь идет о стационарных состояниях. Удобно также считать, что «взрыв пиков» есть просто возникновение некоторой силы отталкивания между ближайшими экземплярами роя, переносимой с помощью экземпляров фотона, который излучается одним экземпляром заряженной частицы и тут же поглощается соседним ее экземпляром в нити. Тогда у нас получится, что если излучающий экземпляр является крайним в нити, то появившийся экземпляр фотона просто вылетит за ее пределы. Пусть фотон образуется при превышении порога d для расстояния между соседними экземплярами в рое. Тогда эволюция сети, включающей экземпляры электрона и фотона, будет выглядеть так. Расстояние между экземплярами по мере расхождения кулоновских центров будет увеличиваться до тех пор, пока в некоторой точке нити оно не превзойдет d, и тогда будет излучен экземпляр фотона, что эквивалентно разрыву нити. После разрыва мы можем предположить, что нить какое-то время сохраняет расстояния меньше d между экземплярами, так что нового излучения фотона не происходит. Тогда движение нити определяется отдачей от испущенного экземпляра фотона и нить соскочит с того кулоновского центра, в окрестности которого произошел ее разрыв. Поскольку начало нити первоначально определяется произвольно, у нас получится, что вероятность роя электрона оказаться около каждого из кулоновских центров будет пропорциональна числу экземпляров, которые находились в окрестности этого центра с самого начала. Напомним, что число экземпляров в единице объема является плотностью роя и она должна приближенно совпадать с $|\Psi|^2$. Это и дает нам согласование с правилом Борна для вычисления квантовых вероятностей перехода в одно из основных стационарных состояний: около первого или около второго кулоновского центра при распаде основного состояния в поле двух кулоновских центров. Разумеется, эти рассуждения не являются строгими.

Рассмотрим процесс ассоциации атома водорода и протона в молекулярный ион водорода. Сначала рассмотрим модель Борна – Оппенгеймера, то есть будем считать протоны классическими частицами, а квантовый электрон, находящийся в основном состоянии в поле двух кулоновских центров, — источником притягивающего потенциала между ними. График потенциальной энергии двух протонов с учетом притяжения их электроном и кулоновского отталкивания выглядит так, как показано на рисунке 4.3. Если рассмотреть просто движение ядер в данном потенциале, ассоциации

не произойдет никогда, в силу закона сохранения энергии. Самая простая модель ассоциации заключается в том, что мы считаем, что потенциал действует, только если два протона находятся в так называемом связанном состоянии. Связанное состояние двух протонов возникает из несвязанного, если расстояние между протонами становится меньше некоторой границы d, и переходит снова в несвязанное, когда это расстояние становится больше некоторого большего числа $D > d$. В этом случае у нас будет происходить ассоциация двух протонов в молекулярный ион.

С точки зрения сети это выглядит так. Сначала электронная нить была навита клубком вокруг одного из протонов. Сближение двух протонов вызывает прыжок электронной нити, которая будет двигаться в окрестности этих двух протонов одновременно. Такой прыжок происходит при преодолении барьера d. Нить продолжает охватывать собой оба протона, если расстояние R между ними меньше D, и соскакивает на один из протонов только после того, как расстояние превзойдет этот порог: $R > D$. Такой сценарий выглядит достаточно правдоподобно для того, чтобы служить в качестве элемента эвристики.[32]

5.14.1. Указатели

Для описания динамики сети во времени полезным инструментом может быть явное выделение для всякого экземпляра реальной частицы других экземпляров, с которыми он связан связями. Тогда динамика сети может быть описана как изменение этих указателей. Мы не будем давать общего алгоритма для такой смены, а вместо этого рассмотрим один пример, в котором динамика указателей помогает построить качественную динамическую картину.

Этот пример — зависимость стабильности атомного ядра от состояния электронной оболочки. Такая зависимость неожиданна с точки зрения КЭД, поскольку энергии электростатического взаимодействия электронов с ядром на много порядков ниже энергии внутриядерных взаимодействий нуклонов. Эксперимент заключается в накачке ядра нейтронами, при котором оно переходит в пограничное состояние, которое стабильно только при заполненных электронных оболочках. При ионизации такого атома немедленно начинается распад ядра, то есть вылет из него нейтронов. Это ясно говорит о наличии связи между электронами и протонами, которая влияет также и на межнуклонные взаимодействия. Отметим, что вряд ли

[32]Эта простейшая химическая реакция — переход электрона — некоторыми химиками ассоциируется с метанием гарпуна. Визуальная модель этой реакции подтверждает такую аналогию. Возможно, более правильное сравнение было бы с метанием аркана, так как здесь ситуация будет более равноправной.

можно надеяться объяснить данный процесс «гидродинамическим» давлением электронов на ядро, которое уменьшается при ионизации, делая ядро нестабильным, подобно тому, как удаление атмосферы приводит к испарению водоемов планеты. Дело в том, что размеры электрона существенно больше, чем у ядра (его магнитный момент значительно больше, при меньшей массе). Поэтому «гидродинамический» способ построения модели данного процесса встречается с серьезными затруднениями.

Мы рассмотрим подход к моделированию этого процесса в терминах сети. Пусть заряд ядра равен k и в нем q нейтронов. При этом квантовым миром модели будет кортеж экземпляров всех нуклонов и электронов, входящих в атом:

$$s^p_{1,i_1}, s^p_{2,i_2}, \ldots, s^p_{k,i_k}, s^n_{1,j_1}, s^n_{2,j_2}, \ldots, s^n_{q,j_k}, s^e_{1,l_1}, s^e_{2,l_2}, \ldots, s^e_{k',l_{k'}}. \qquad (5.41)$$

Здесь верхний индекс обозначает вид экземпляра (протон, нейтрон или электрон), в нейтральном состоянии атома $k = k'$, в ионизированном $k' < k$. Введем дополнительное предположение, согласно которому указатели экземпляров такого кортежа устроены так, что экземпляр любой реальной частицы указывает на экземпляр небольшого числа других частиц (2–3), которые остаются неизменными независимо от выбора этого экземпляра (то есть собственные связи некоторым образом регламентированы). Для нейтрального атома указатели должны оставаться в стабильном состоянии, так как здесь ничего не происходит. Ионизация (отъем электронов) приводит к неизбежному изменению указателей, так что в ионизированном атоме уже нельзя утверждать, что они останутся неизменными. Возникший дефицит электронов должен привести к тому, что возникнет конкуренция за них со стороны протонов, что приведет к постоянной смене указателей. Неизбежность постоянной смены указателей вытекает из модели динамической диффузии, так как отсутствие электрона — дырка — должна вести себя подобно электрону, то есть проявлять квантовые свойства, в частности, ее «рой» должен расплываться со временем.

Разумеется, это никоим образом нельзя трактовать как «объяснение» данного эффекта, а исключительно как указание на возможность получения такого процесса при моделировании на основе коллективного поведения.

Для связей между экземплярами можно ввести некоторое подобие упругих сил, которые должны квантоваться так, что связь разрывается при превышении некоторого порога нагрузки, который можно назвать прочностью данной связи. Тогда отсутствие реального электрона должно, в силу описанного механизма, приводить к небольшому росту напряжения связей внутри кортежа (5.41). Если прочность связи между экземплярами протонов и нейтронов ниже такой нагрузки, это приведет к ее разрыву.

Эта модель чисто эвристическая, и она не может дать никаких численных результатов до тех пор, пока мы не определили численные параметры, соответствующие связям. Тем не менее, такое описание данного процесса, по-видимому, позволяет строить его визуальную картинку, в отличие от других вариантов объяснения, а это является аргументом в пользу метода коллективного поведения. Надо отметить, что метод коллективного поведения не ограничен КЭД, поскольку динамика сети в данном случае определяется также и ядерными силами.

Итак, мы в общих чертах показали, как должны выглядеть в методе коллективного поведения — на языке сети — распад основного состояния электрона в молекулярном ионе водорода, с испусканием фотона, а также поглощение свободного электрона кулоновским полем протона. Данную эвристику можно использовать и в более сложных случаях, и это требует применения компьютеров. Важно отметить, что описанная картина выходит за пределы стандартной квантовой теории. В квантовой электродинамике можно рассмотреть данную и аналогичные ей простые задачи в терминах волновых функций. Это стандартное рассмотрение не может быть масштабировано на случай нескольких частиц (даже 3) по фундаментальным причинам. Предложенный нами путь свободен от этого изъяна. Этот конструктивный путь содержит такие понятия, как экземпляры и нить, которых нет в стандартном формализме и которые позволяют произвести конструктивное «изображение» процессов такого рода, которое бы обладало свойством масштабируемости: аналогично можно рассматривать и более сложные системы.

5.14.2. Разделение пространственных и спиновых переменных

Рассмотрим с точки зрения коллективного поведения пример с механическим перемещением магнита, где его магнитное поле, создаваемое состоянием электронных спинов, перемещается вслед за самим магнитом. Стандартный гильбертов формализм не позволял рассматривать эту задачу единым образом с состояниями отдельных электронов, поскольку перемещение не действовало на спиновые переменные. Это серьезная проблема стандартного формализма. Единственным способом действия на спиновые переменные является спинорбитальное взаимодействие, которое очень мало, и с его помощью нельзя объяснить эффект поворота магнитного поля вслед за механическим перемещением магнита.

В методе коллективного поведения кусок металла представляется в виде сети. Каждый квантовый мир этой сети охватывает все экземпляры частиц, участвующих в данном процессе. Пусть этот мир имеет вид $s^1_{i_1}, s^2_{i_2}, \ldots, s^n_{i_n}$, где n — число всех частиц. Если такой мир принадлежит

тонкому слою, он участвует в динамической диффузии со другими мирами тонкого слоя, обмениваясь с ними импульсами. Пусть число всех частиц n мало. Тогда центр масс данного мира смещается на расстояния такого же порядка δx, что и отдельные экземпляры. Если же n велико, это смещение будет гораздо меньше, потому что суммарная масса такого мира будет больше.

Орбитальный момент одного электрона является настоящим моментом импульса роя экземпляров, представляющих данный электрон. Спин электрона также можно представить как момент импульса, но только если мы предположим, что электрон состоит из нескольких частей, отстоящих одна от другой на расстояние $\delta_s x \ll \delta x$.[33] Поэтому, строго говоря, не существует отдельных спинового и координатного пространства состояний. Конфигурационное пространство едино, и спин автоматически оказывается связанным с пространственными координатами.

Пусть в рассматриваемой системе мало частиц, например, это электрон в атоме, находящемся в вакууме. Тогда не существует длинных собственных связей, соединяющих его с экземплярами частиц, входящих в систему отсчета. Спин остается неизменным, даже если мы изменим состояние электрона, например, если он приобретет дополнительный орбитальный момент. В этом случае мы можем считать, что есть отдельные пространства состояний спина и координатного пространства самого электрона, как это и предполагается в нерелятивистской квантовой механике. Если же такие связи есть, как в целом куске металла, то это означает, что образовались миры с большой массой. Эти миры составлены из экземпляров атомов куска металла, связанных связями. И квантовое поведение этих новых миров таково, что сеть для них должна иметь очень малое зерно пространственного разрешения δx, которое теперь будет сравнимо с $\delta_s x$.[34] Тогда у нас полу-

[33] Представление об элементарности электрона обычно делается на основе манипуляций с уравнением Дирака, из которых находится магнитный момент электрона с большой точностью, чего не получается в случае протона. Из этого обычно делается вывод о том, что электрон есть истинно элементарная частица, а протон — нет. Этот вывод дополнительно подкрепляется кварковой структурой нуклонов, отчетливо проявляющейся при рассеянии на них. Это, тем не менее, совсем не значит, что электрон элементарен. Его большой магнитный момент говорит как раз об обратном. Просто его структура может быть очень однородной, в отличие от кварковой структуры нуклона. В любом случае, поскольку коммутационные соотношения для спинов совпадают с таковыми для классических моментов, моделирование спинов с помощью таких приемов является вполне законным. Важно лишь соблюдать все положения КЭД. Представление спинов в координатном пространстве и следующая из него простая модель большого ансамбля спинов говорит в пользу этого пути.

[34] Это вытекает из формулы (4.19): если масса большая, волновая функция расплывается медленно. Надо выбрать некоторое зерно по координате x и суммировать амплитуды, полученные по формуле (4.19), внутри этих зерен. На большом расстоянии от нуля вклады исчезнут благодаря нарастающей деструктивной интерференции.

чится связь спина с механическим перемещением. Таким образом, здесь не будет отдельного координатного и спинового конфигурационного пространства, то есть мы должны рассматривать процесс в общем виде.

Вообразим себе вращающийся волчок, касающийся твердой поверхности пола. Если у нас есть возможность только очень грубых манипуляций, захватывающих всю комнату, где происходит эксперимент, например вращение всей этой комнаты, волчок будет сохранять свое положение не относительно комнаты, а относительно неподвижных звезд, то есть будет испытывать мгновенное вращение, а также прецессию и нутацию своей мгновенной оси вращения, как если бы комнаты не было вовсе. Примерно это происходит при движении электрона внутри атома, где спин практически не зависит от орбитального движения. Но если у нас есть возможность манипуляций с меньшим зерном разрешения, так что мы способны держать волчок за его ось, то ситуация будет иной. Мы сможем изменить положение этой оси относительно комнаты, например, заставив эту ось точно следовать за поворотом всей комнаты. Это и происходит в куске металла, где магнитное поле сохраняет свою ориентацию относительно самого куска, а не удаленных звезд.

Можно ли достигнуть эффекта близости $\delta_s x \approx \delta x$, не прибегая к рассмотрению многочастичных ансамблей? Да. Для этого надо разогнать частицу, чтобы длина ее волны де Бройля оказалась сравнимой с $\delta_s x$. Это означает релятивистское рассмотрение электрона, при котором, действительно, координатные и спиновые переменные фактически оказываются в конфигурационном пространстве единого гильбертова пространства квантовых состояний (см. [17]).

Разумеется, приведенное рассуждение о частях электрона должно рассматриваться как условное описание элементов административной части нашей модели, то есть применение такого метода не означает возможности «разделения» электрона на реальные части. Это обеспечивается нашим соглашением о нитях, связывающих экземпляры одного роя (о том, что они имеют очень большую прочность).

Масштабируемым рассмотрением является именно представление большого ансамбля в виде сети экземпляров. Только такое представление дает нам согласие с принципом Галилея относительности движения. Движение координатных осей должно описываться в тех же терминах, что и движение рассматриваемой системы. Это требует единообразного подхода к большим и малым ансамблям, что у нас и получится в методе коллективного поведения. Стандартный же квантовый формализм рассматривает большой ансамбль (систему отсчета) и малый (квантовую систему) как две принципиально разные системы.

5.14.3. Связи как инструмент масштабирования модели

Почему мы посвящаем так много внимания обсуждению связей между экземплярами? Дело в том, что связи есть важнейший элемент конструктивной модели, обеспечивающий ее масштабирование с малочастичных частиц на макроскопические ансамбли. Ничего подобного нет в стандартной модели. Мы видели это на примере разделения спиновой и пространственной частей волновой функции. В действительности это только частный пример того, как квантовые представления могут применяться к макроскопическим объектам. Такое применение основано на образовании таких объектов из мелких частей, к которым непосредственно применим стандартный подход волновых функций (или обратный процесс распада). И в этом процессе центральным объектом является именно формирование собственной связи между отдельными экземплярами атомов, объединяющей их в большие кортежи.

Если большое количество атомов с волновыми функциями $|\Psi_1\rangle$, $|\Psi_2\rangle, \ldots, |\Psi_n\rangle$ ассоциируются с образованием твердого тела, то состояние такого тела описывается при классическом подходе движением центра масс, а также тремя угловыми скоростями, то есть львиная доля информации об исходных состояниях атомов полностью утрачивается. Дело не меняет и вылет фотонов. Для описания стандартными методами получившегося макроскопического ансамбля, то есть волновой функции $|\Psi(r_1, r_2, \ldots, r_n)\rangle$, не хватит всех компьютеров мира.

Но если мы пользуемся конструктивным подходом, ситуация изменится! Предположим, что мы можем хранить в памяти компьютера порядка n объектов.[35] Тогда мы сможем работать с сетью экземпляров, представляющей квантовое состояние данного макроскопического тела, то есть учитывать именно квантовые эффекты, происходящие между его частями. Взаимодействие миров через несобственные связи обеспечивает нам возможность работать не только с состояниями типа W или GHZ, но и с более сложными. Это критически важно для анализа поведения такого тела, например, динамики его разрушения при нагрузках, и т. д. У нас есть потенциальная возможность (только возможность!) проследить влияние на течение макроскопического процесса отдельного атома внутри такого тела и даже состояний отдельных частей внутри атома. Эту возможность нам дает использование связей.

Из примера, рассмотренного в предыдущем параграфе, видно, что при формировании связи изменяется зерно пространственного разрешения, ха-

[35] Для макроскопических тел и n может оказаться слишком большим. В главе, посвященной ПКЕ, мы обсудим эту тему.

рактеризующего рассматриваемый процесс, то есть чем связь больше, тем это зерно меньше. Это может быть использовано для проверки различных гипотез о строении пространства на очень малых расстояниях с помощью доступной техники макроскопических размеров. Это может стать доступным в ходе совершенствования компьютерных моделей.

Понятие связи есть центральное понятие конструктивной квантовой теории. Попытаемся понять неизбежность введения этого понятия, прослеживая шаг за шагом воображаемое моделирование динамики квантовых систем многих частиц без использования связей. Итак, предположим, что мы решили моделировать такую динамику, опираясь на понятие волновой функции единичной частицы. Тогда все взаимодействие между частицами сводится к действию потенциала, который вычисляется стандартным усреднением по их волновым функциям. Для того чтобы у нас получилась правдивая картина, переходящая в макроскопическое описание, например, твердого тела, которое получается в результате фазового перехода, мы должны прийти к описанию отдельных атомов не с помощью волновых функций, а с помощью обычных координат.

Можем ли мы надеяться на достижение этого необходимого результата в такой воображаемой модели? Рассмотрим отдельный атом в нашей модели. Предположим, что мы в какой-то момент описали его положение с помощью задания его координат x, y, z. Например, это окажется необходимым, если он сам входит в систему координат, в которой мы хотим рассматривать какой-нибудь частный процесс. Как только мы это сделали, данный атом приобретет скорость, достаточную не только для вылета из рассматриваемой системы, но и для вылета из нашей Галактики! Подчеркнем, что такая скорость возникнет автоматически как результат того, что у атома на каком-то шаге появились его точные координаты. Соотношение неопределенности «координата–импульс» невозможно устранить ни при какой интерпретации квантовой теории. Например, мы можем пользоваться методом роя для отдельных атомов. Тогда фиксация положения атома будет означать возникновение огромной интенсивности обмена импульсами между его экземплярами (что, согласно определению динамической диффузии, включает спонтанное приобретение таких импульсов), что делает бессмысленным продолжение такого рассмотрения. Атом будет находиться в буквальном смысле «неизвестно где», причем скорость расплывания его волновой функции, если мы ее введем с помощью зерна пространства и времени, никак не будет зависеть от других частиц.

Совершенно иную картину дает нам наличие связей между экземплярами разных атомов. Возникновение связи означает рождение новой частицы, с массой, равной сумме масс ее компонентов. Это автоматически ведет

к тому, что такая же, как и в случае отдельного атома, неопределенность в импульсе приведет к гораздо меньшему разлету экземпляров этой самой новой частицы. Если она достаточно велика, это означает, что ее положение изменится на ничтожную величину, то есть мы получим возможность фиксировать положение отдельных атомов, при условии, что они связаны связью. Фактически, именно связь берет на себя огромную неопределенность в импульсах атомов, так как связь перераспределяет эти импульсы между всеми экземплярами данного эверетговского мира.

5.15. Реакция ассоциации двух атомов

5.15.1. Описание в стандартном формализме

Рассмотрим метод коллективного поведения для нескольких частиц на одном простом примере. Это будет рассеяние протона на атоме водорода. На неподвижный в выбранной системе координат атом водорода, состоящий из протона и электрона, налетает с некоторого большого расстояния другой протон. Основными каналами такого рассеяния будут следующие: распад системы (образование двух отдельных протонов и отдельного от них электрона), сохранение вида продуктов (на выходе один протон и отдельный от него атом водорода) и формирование молекулярного иона водорода из двух протонов и связывающего их электрона. Сохранение вида продуктов может произойти двумя путями: электрон остается в первоначальном атоме водорода или переходит к протону. Последний канал называют перезарядкой, несколько кадров визуализации его моделирования методом коллективного поведения приведены на рис. 5.8.

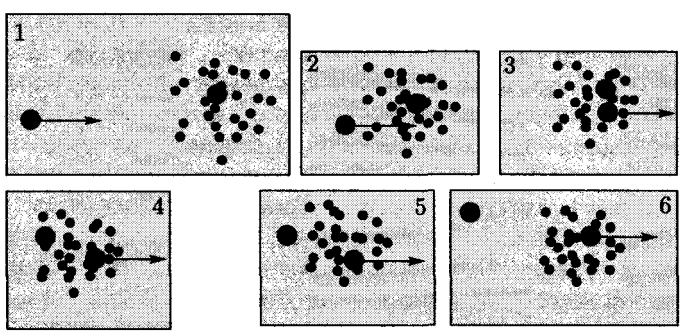


Рис. 5.8. Перезарядка при рассеянии протона на атоме водорода. Рисунок из статьи [28]

Отметим, что в реальных экспериментах с молекулярными пучками последний канал практически отсутствует, так как для его наличия необходима очень маленькая относительная скорость протона. Если бы мы взяли вместо протона второй атом водорода, то канал с образованием молекулы реально наблюдался бы в экспериментах, и все нижесказанное можно было бы проиллюстрировать на таком реальном примере. Мы, тем не менее, рассмотрим именно налетание протона как модельную задачу по технической причине: она предусматривает только 4 вышеописанных канала, в отличие от задачи с нейтральными атомами, где каналов гораздо больше.

Рассмотрим сначала канал образования молекулярного иона водорода.[36] Мы сделаем следующие упрощающие предположения (от которых мы потом избавимся):

1) протоны, атом водорода и молекулярный ион водорода считаем классическими частицами, которые характеризуются только своими координатами и импульсом;

2) в течение всей реакции электрон находится в основном состоянии в поле двух протонов;

3) происходит неупругое рассеяние, в котором каким-то образом теряется энергия (это необходимо для того, чтобы ассоциация двух протонов вообще произошла).

Такая грубая модель позволяет построить удовлетворительный видеофильм реакции ассоциации молекулярного иона водорода. Вместо этой грубой схемы можно использовать более рафинированные рассмотрения, учитывающие переходы между основными состояниями электрона у каждого отдельного протона (схема Ландау – Зинера), но это пока для нас не существенно. Главное — протоны рассматриваются как классические точечные частицы, которые в ходе реакции сцепляются в одну новую частицу. При такой постановке начальное состояние системы будет полностью определять ее конечное состояние, что, конечно, не имеет места в действительности. Для построения более реалистичной модели надо учитывать квантовый характер самих ядер.

Как данная реакция рассматривается в стандартном формализме? Обозначим через $|\psi^j_{nuc\ 1}\rangle$ j-е базисное состояние первого ядра, — $|\psi^k_{nuc\ 2}\rangle$ через k-е базисное состояние второго ядра, а через $|\psi^s_{el}\rangle$ — s-е базисное состояние

[36] Этот канал не наблюдается в реальных экспериментах с молекулярными пучками, потому что для того, чтобы он имел заметную вероятность, взаимная скорость должна быть очень маленькой (см. [56]).

электрона (или системы электронов, если речь идет о столкновении атомов). Электронное состояние еще называют электронным термом, поскольку с его помощью можно подсчитать энергию взаимодействия двух ядер, если считать электрон не как отдельную частицу, а как некий фактор, порождающий потенциал притяжения между двумя протонами, которые без этого фактора просто отталкивались бы друг от друга в силу кулоновского поля.

Пусть сначала центр масс системы ядер (вклад в центр масс электронов в силу их легкости не учитываем) неподвижен. Тогда мы можем считать, что j есть просто расстояние первого протона до центра масс и пара углов, определяющих его точные координаты. Тогда можно считать, что в волновую функцию системы «протоны + электрон» входят только слагаемые с $j = k$, так как позиция первого протона однозначно определяет позицию второго. Далее, электронный терм, вообще говоря, зависит от расстояния между протонами, то есть мы также можем принять, что в общее состояние входят только слагаемые с $j = s$. У нас получится волновая функция всей системы вида

$$|\psi_{H2+}\rangle = \sum_j \lambda_j |\psi^j_{nuc\ 1}, \psi^j_{nuc\ 2}\psi^j_{el}\rangle.$$

Таким образом, в процессе ассоциации общая волновая функция оказывается запутанной как между ядрами, так и между ядрами и электроном.

Теперь вспомним о центре масс всей системы. Если мы рассматриваем протоны как квантовые частицы, то мы обязаны так же рассматривать и их центр масс. Но тогда вывод о равенстве $j = k = s$ будет уже неверным, и волновая функция системы приобретет законченный вид

$$|\Psi_{H2+}\rangle = \sum_{j,k,s} \lambda_{j,k,s} |\psi^j_{nuc\ 1}, \psi^k_{nuc\ 2}\psi^s_{el}\rangle. \tag{5.42}$$

Сам процесс описывается так: при сближении ядер, электрон, первоначально находившийся в состоянии $1s$ (к примеру) около одного из ядер, переходит в основное состояние в поле двух ядер, одновременно испуская фотон и таким образом теряя энергию. Возникает так называемое связанное состояние двух атомов.

В процессе ассоциации принципиальную роль играет запутанность состояния как между ядрами, так и между ядрами и электроном. Действительно, предположим, что нам как-то удалось свести $|\Psi_{gen}\rangle$ к виду $|\Psi_{nuc\ 1}\rangle|\Psi_{nuc\ 2}\rangle$, где в ядерные состояния входят и электронные. Тогда мы получили бы такую ситуацию, когда движение двух атомов описывается

межатомным потенциалом. Независимо от формы этого потенциала, если атомы сближаются из бесконечности, они должны после взаимодействия удалиться снова на бесконечность по закону сохранения энергии. То есть ассоциации не произойдет.

Когда одно ядро сближается с другим и возникает запутанное состояние с электронами, мы уже не можем говорить о энергии ядер, ее просто не существует. Есть только энергия всей системы «ядра + электроны + фотоны». Именно запутанность позволяет перераспределить первоначальную кинетическую энергию ядер в энергию вылета электрона (в случае распада системы) или в энергию фотонов (в случае ассоциации в молекулу).

Итак, вся химия построена на существовании запутанных состояний. Но в стандартном формализме нет терминов для детального описания реакции ассоциации. Именно по этой причине отсутствуют эффективные модели химических реакций, основанные на стандартном формализме.

Метод коллективного поведения дает нам необходимые средства для описания ассоциации. Образование кортежей экземпляров происходит скачком, из-за дискретности конфигурационного пространства электронов, в момент сближения атомов. Таким образом, мы работаем с некоторым числом различных кортежей вида «экземпляр первого протона, экземпляр второго протона, экземпляр электрона». Но мы можем вообще исключить электроны из явного рассмотрения, подразумевая, что они есть только фактор, связывающий ядра.

Исключение из рассмотрения электрона как частицы совершенно не принципиально и делается только для простоты иллюстрации. Если первый выбор пар (экземпляр первого протона, экземпляр второго протона) сделан так, что во многих сформированных парах протоны отстоят друг от друга на расстояние, сильно отличающееся от дистанции r_0 между протонами в стабильном состоянии молекулярного иона, то протоны в таких парах разлетятся на большое расстояние друг от друга, причем так, что эти пары окажутся в разных группах после нашей процедуры группировки. После нескольких итераций нашего процесса выбора сценариев это приведет к росту числа пар, в которых межпротонное расстояние близко к r_0, и мы в результате получим преимущественное количество пар, которые и формируют молекулярный ион водорода.

В том случае, когда начальные положения первого протона и атома водорода далеки, эта схема должна быть расширена. Здесь мы должны принимать во внимание также и фотоны, рожденные этой системой, которые при вылете уменьшают ее энергию, делая возможной ассоциацию в молекулу. Фотоны без особых проблем включаются в сформулированную схему отбора квантовых состояний, но для их рассмотрения надо немного рас-

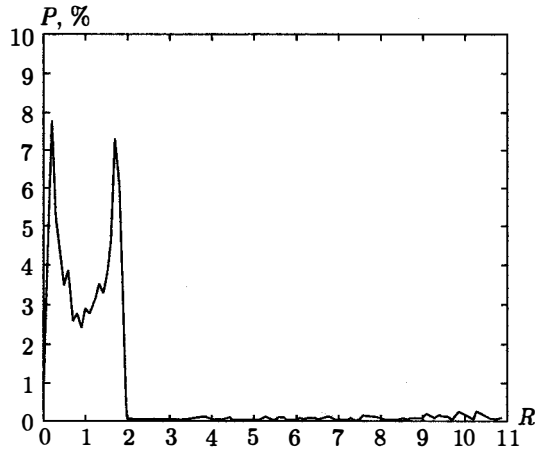


Рис. 5.9. Плотность распределения экземпляров пар протонов в зависимости от межъядерного расстояния при ассоциации молекулярного иона (рисунок из работы [5])

ширить наш формализм, добавив в базисные состояния время. Это сделано в следующем параграфе. Здесь же отметим, что для грубого моделирования процесса ассоциации точный учет вылетающих фотонов не является необходимым. Мы можем заменить их некоторым родом трения, а также разбить временной интервал Δt на меньшие сегменты так, чтобы на последнем из них пространственные положения реагентов были уже достаточно близки для применения описанной процедуры отбора. Это, разумеется, даст только очень грубую картину процесса ассоциации. Ее более точное рассмотрение требует прямого включения в данную модель фотонов.

Описанная нами модель симуляции химической реакции ассоциации касается базисных понятий квантовой механики. Она использует многомировую картину квантовой физики Эверетта. Каждый кортеж, состоящий из экземпляров реальных частиц, представляет отдельный квантовый мир. Отдельные миры взаимодействуют друг с другом, так что процесс отбора играет роль арбитра в этом взаимодействии. Само же взаимодействие через механизм динамической диффузии представляет собой точную форму преквантовых полей, порождающих видимую квантовую динамику.

5.15.2. Общая методология коллективного поведения

Как применить к рассматриваемому случаю метод коллективного поведения? У нас должна происходить потеря энергии, без которой ассоциация

невозможна, что говорит о том, что либо из системы вылетают электроны, либо вылетают фотоны (в действительности фотоны вылетают всегда). Поскольку мы игнорируем электроны как настоящие частицы, будем предполагать, что вылетают фотоны, и покажем, как можно было бы учесть этот канал потери энергии.

Известно множество реакций, для которых необходимым условием является лазерное излучение или видимый свет. В этих случаях естественно включать фотоны в описание таких реакций. Однако многие реакции идут без внешних источников фотонов. Формализм, нужный для описания химических реакций, происходящих без участия внешних источников фотонов, не должен содержать экземпляров фотонов. При стандартном описании в рамках квантовой химии подобные реакции идут либо при условии уменьшения потенциальной энергии реагентов, либо при наличии внешних источников тепла, то есть под действием кинетических соударений. Мы рассмотрим, как можно было бы облегчить введенный нами формализм коллективного поведения для случая реакций, идущих без внешнего источника фотонов.

Здесь мы будем рассматривать усеченную версию роя КЭД, которая получается из полного роя вида (5.38) исключением из кортежей всех экземпляров фотонов. Назовем такой рой усеченным роем КЭД. Он отличается от обыкновенного роя для ансамбля частиц только тем, что в атрибуты всех экземпляров входит время и кортежи сгруппированы по принципу сохранения истории каждого кортежа, как это указано выше. Посмотрим, что произойдет, если мы применим к такому рою процедуру отбора квантовых состояний, сформулированную в предыдущем параграфе.

Допустим, мы рассматриваем ассоциацию двух протонов в молекулярный ион водорода, как и выше, и пусть r_0 есть радиус стационарного состояния протонов в таком ионе. В одну клетку объединяются кортежи с близкими значениями как координат, так и времени, поскольку теперь, в отличие от случая простой квантовой механики без фотонов, у нас в атрибутах экземпляров присутствует время t. Теперь в одной клетке конфигурационного пространства у нас окажутся кортежи с разным временем t. Это означает более тонкое различие кортежей, чем в рассмотренном ранее случае, когда времени не было, то есть кортежи различались исключительно по пространственным положениям экземпляров.

Действительно, предположим, что кортежи из двух экземпляров s_1, s_2 двух протонов имеют такие координаты экземпляров, что расстояние между экземплярами сильно отличается от r_0, и они имеют разное значение времени. Назовем такие кортежи неканоническими, а другие, у которых расстояние между экземплярами близко к r_0, назовем каноническими. То-

гда в течение малого промежутка времени Δt, на котором рассматривается перераспределение кортежей в результате отбора, два экземпляра вида

$$(c_1^1, s_1^2),\ (c_2^1, c_2^2) \tag{5.43}$$

с разным временем $t(c_1) \neq t(c_2)$ сильно разойдутся по пространству — гораздо сильнее, чем такие пары кортежей, у которых расстояние между экземплярами близко к r_0 (см. рис. 5.10). Это произойдет в силу того, что r_0 есть расстояние, обеспечивающее положение устойчивости молекуле. Таким образом, в процедуре отбора неканонические кортежи подвергнутся расформированию с большей вероятностью, чем канонические. Это соответствует полному варианту отбора с участием экземпляров фотонов. Действительно, представим движение кортежа во времени как движение гармонического осциллятора. Для неканонических кортежей амплитуда колебаний и, следовательно, ускорение протонов будут больше, чем для канонических. Поскольку вероятность испускания фотона увеличивается с ростом ускорения протонов, мы получим, что вероятность испускания экземпляра фотона будет больше для неканонических кортежей. Поскольку испускание экземпляра фотона сразу добавляет заполненное новое измерение в конфигурационное пространство (не испущенный экземпляр фотона, по определению, имеет те же координаты, что и соответствующий экземпляр частицы), группы, содержащие неканонические кортежи, окажутся меньше по числу элементов, чем группы, содержащие канонические кортежи. Это и приведет к возрастанию доли кортежей, соответствующих молекуле.

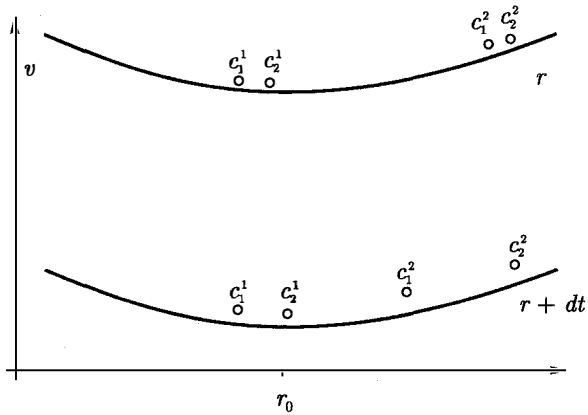


Рис. 5.10. Разное расхождение экземпляров во времени

Заметим, что описанный путь образования молекулы при моделировании с явным учетом времени — грубее, чем полная модель с явным учетом фотонов. Например, здесь мы совершенно не учитываем поляризацию испущенных фотонов и эффекты, которые могут при этом возникнуть. Но такая урезанная модель гораздо проще в работе, так как нам здесь не надо явно производить операцию испускания фотона, как в полной версии. То есть урезанная версия оперирует только с экземплярами химических объектов — атомных ядер (и, возможно, электронов, если по приведенному образцу рассмотреть реакцию переноса электрона с атома на атом).

5.15.3. Как практически строить модель ассоциации

Посмотрим теперь на модель ассоциации с практической точки зрения. Будем снова, для простоты, игнорировать электроны как самостоятельные частицы, рассматривая их только как фактор, создающий между атомами потенциал типа леннард-джонсоновского. Сначала у нас имеются незапутанные состояния двух атомов, а в результате реакции появляется запутанное состояние этих атомов, которое следует рассматривать как молекулу, являющуюся результатом данной реакции.

Что мы реально хотим от компьютерной модели, помимо вычисления сечений рассеяния в зависимости от скорости и прицельного расстояния? Мы хотим, чтобы она была масштабируемой: то есть чтобы в ней было явно указано, как поступать в случае, если вместо рассматриваемых атомов у нас будут молекулы, причем все более и более сложные, так что в конце концов получится тело макроскопических размеров. Например, нам бы хотелось, чтобы наша модель, в принципе, годилась бы для описания фазовых переходов, например, из жидкости в твердое тело. Требование масштабируемости важнее, чем точность вычисления сечений рассеяния, так как в случаях сложных молекул нам будет важен динамический сценарий, то есть ответ на вопрос: что получится в результате данного столкновения?

Продукт реакции, молекула, сложнее, чем каждый из исходных компонент, поскольку они не прекращают своего существования внутри нее. Мы должны указать способ дать описание молекулы, по сложности не превосходящее сложность описания исходных атомов. Молекула, в свою очередь, ведет себя как квантовый объект, но более сложной структуры. Допустим, мы решили ограничиться некоторыми типами волновых функций молекулы и их роевым описанием. Тогда надо указать, как именно возможные состояния исходных атомов влияют на параметры волновых функций молекулы, так что если у нас будет больше вычислительных ресурсов, мы смогли бы уточнить это описание, расширив класс рассматриваемых волновых функций.

Рассмотрим самый грубый способ роевого представления, при котором всякий точечный атом представляется в виде пары его экземпляров. Если волновая функция имеет единую фазу, не зависящую от координаты (это всегда выполняется, например, для основных состояний), мы будем считать, что экземпляры просто неподвижны. При строгой ограниченности роя мы должны брать за основу не точность, которая обеспечивается постоянно происходящей отдачей рою импульса тонкого слоя, а способность грубо приближать волновую функцию для любой частицы. Для этого мы ориентируемся на формулы (5.28), стремясь достичь наилучшего сходства с точной волновой функцией нашей грубой картинки, «нарисованной» с помощью только двух экземпляров. Например, перепад фазы означает скорость движения экземпляров, величина модуля — их аккумуляцию в процессе динамической диффузии. Если фаза меняется на π, мы считаем, что экземпляры проходят через поверхность, где плотность роя равна нулю, и надо считать, что они принадлежат тонкому слою. Если на угол $\phi < \pi$ — это означает, что экземпляры движутся в области одной компоненты связности носителя роя.

Рассмотрим преодоление квантовой частицей, представленной в виде двух ее экземпляров, потенциального барьера, превосходящего ее начальную кинетическую энергию. Пусть оба экземпляра первоначально находились в одной ячейке конфигурационного пространства, то есть образовывали «пик». Тогда дополнительная энергия, необходимая для преодоления барьера, берется из внутренней потенциальной энергии роя, которая переходит в кинетическую энергию экземпляров его тонкого слоя при ускорении его на градиенте плотности роя, происходящем при «взрыве пика». Как бы ни был высок барьер, при достаточно малом зерне δx мы получим, что часть тонкого слоя барьер преодолеет. Мы можем представлять эту потенциальную энергию как энергию некой пружинки, соединяющей два экземпляра из тонкого слоя. Тогда получится, что один из экземпляров может получить дополнительную скорость за счет торможения другого и так преодолеть барьер. Дальнейшая эволюция реальной частицы зависит от разности потенциалов E_b и E_a до и после барьера. Чем больше $E_b - E_a$, тем больше вероятность детектирования частицы после барьера, что соответствует механике двух экземпляров, соединенных подобием пружинки. Отличие от волновой функции, вычисленной обычным путем, в явном механизме декогерентности, заставляющей экземпляры держаться вместе.

Мы приходим к модели роя в виде экземпляров тонкого слоя, связанных некоторой пружинкой, напряжение которой имитирует потенциал плотности основной части роя. Тогда выпрямление сжатой пружинки имитирует размазывание волновой функции — «взрыв пиков», то есть эффект,

просто вытекающий из уравнения Шредингера. Но что соответствует сжатию пружинки? Для получения такого эффекта с помощью уравнения Шредингера нам понадобилось бы обратить гамильтониан, то есть рассмотреть вместо эволюции $\exp(-iHt)$ эволюцию $\exp(iHt)$. Если обращение знака при потенциальной энергии не представляет принципиальной проблемы, то та же процедура по отношению к кинетической энергии сталкивается с трудностью. Реализация этого процесса представляла бы особый интерес и ценность. Здесь есть прямая аналогия с квантовым алгоритмом Гровера (см. приложение), при котором такой процесс сжатия амплитуды реализуется методом квантового компьютинга. Это наводит на мысль о том, что такой процесс (в отличие от расплывания) требует многочастичности. В нашей модели сжатие пружинки выполняет ту же задачу, что и селекция квантовых состояний, при которых плотность концентрируется как раз в области «пиков». В любом случае представление тонкого слоя квантового состояния в виде пружинки представляется неплохим приемом для грубого моделирования квантовой динамики.

Возьмем в качестве следующего примера три типа волновых функций, полученных из основного и первых возбужденных состояний электрона в водородоподобном атоме. Наши приемы приводят к динамике двухэкземплярного роя, изображенной на рисунке 5.11.

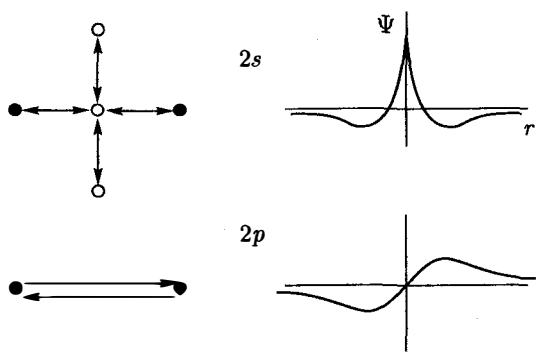


Рис. 5.11. Динамика роя из двух экземпляров

Какие запутанные состояния можно построить из двух частиц, если ограничиться столь же простыми их видами? Нужно испробовать все типы спаривания экземпляров, при которых эти экземпляры участвуют — каждый в своей — в одночастичной диффузионной динамике. Такие виды спаривания, при одинаковой одночастичной динамике, будут отличаться друг от друга только тем, в какой момент мы произвели соединение пар экземпля-

ров (см. рисунок 5.12). Можно также получать и более сложные квантовые состояния вида $\sum_j \lambda_j |\psi^j_{simple}\rangle$ из уже полученных нами $|\psi^j_{simple}\rangle$, если считать, что кортежи движутся согласно динамике $|\psi^j\rangle$ время, пропорциональное $|\lambda_j|^2$.

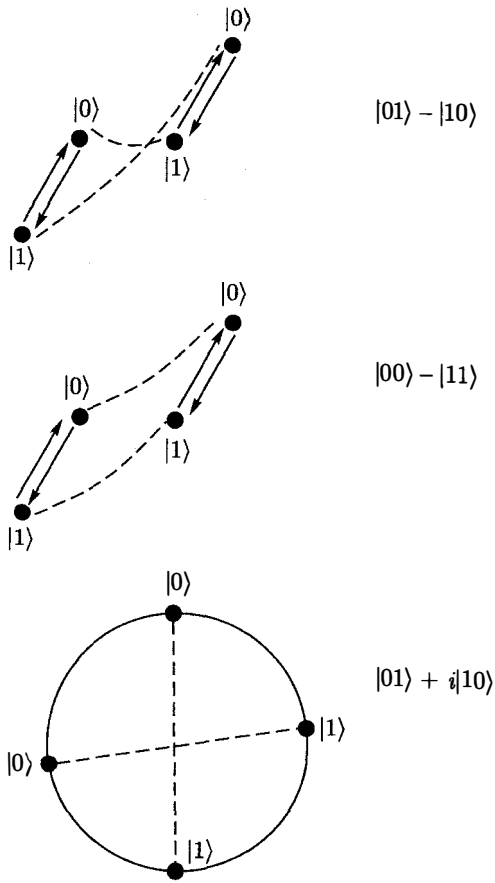


Рис. 5.12. Альтернативные формы связей

Такой способ «рисования» волновых функций использует только два экземпляра от каждой частицы. Эта форма коллективного поведения хороша тем, что все фундаментальные взаимодействия есть взаимодействия

двух частиц, и к тому же, генетический отбор сводится также именно к сравнению двух кортежей по степени их «важности» в представлении моделируемого процесса.

Описание эволюции запутанного состояния также не представляет принципиальных затруднений. Рассмотрим два квантовых состояния $|\Psi_1\rangle = |00\rangle - |11\rangle$ и $|\Psi_2\rangle = |01\rangle - |10\rangle$, представленных сетями на рисунке 5.12. Представим, что мы производим селекцию квантовых состояний по признаку мощности групп, как это описано выше. Тогда наибольшие шансы на выживание будут у таких кортежей, для которых вариация действия будет наименьшей.[37]

Сравним вариации действия $\dfrac{\delta S[\gamma]}{\delta\gamma}$ для траекторий, характеризующих $|\Psi_1\rangle$ и $|\Psi_2\rangle$. Примем, что взаимодействие имеет потенциал, близкий к квадратичному в точке минимума (как потенциал Леннарда–Джонса в окрестности точки минимума), причем положение этого минимума расположено в центре рассматриваемой системы в обоих случаях. Тогда для $|\Psi_1\rangle$ потенциальная энергия будет меньше, чем для $|\Psi_2\rangle$. Следовательно, вариация действия для нее также будет по абсолютной величине меньше. Значит, более устойчивым в генетическом отборе будет состояние $|\Psi_1\rangle$. Заметим, что здесь мы, как и полагается при применении принципа наименьшего действия, сравнивали не действия как таковые (их сравнение дало бы прямо противоположный результат — большая потенциальная энергия ведет к уменьшению действия), а их вариации: малые изменения траектории $|\Psi_1\rangle$ дадут меньшие изменения действия, чем малые изменения траектории $|\Psi_2\rangle$. Практически этот вывод может проявиться в виде испускания фотона состоянием $|\Psi_2\rangle$, переводящим его в $|\Psi_1\rangle$. Такой процесс также можно описать на языке роев, если представлять фотон как два его экземпляра, колеблющиеся вдоль линии, параллельной движениям испустивших их экземпляров заряженной частицы (на практике это — электрон, а не ядро) и одновременно движущиеся вдоль направления импульса.[38] Аналогично можно рассматривать и более сложные состояния атомов, например, соответствующие круговым движениям.

[37] Это похоже на классическую динамику. В действительности, все так и есть: отличие диффузионной динамики от классической, помимо зависимости от зерна, только в том, что происходит специфическое перераспределение импульсов от тонкого слоя к основному рою, в ходе которого экземпляры могут спонтанно приобретать или терять скорость. Поэтому в применении принципа наименьшего действия к квантовой динамике нет ничего удивительного.

[38] Если экземпляры двигались по окружности, как в третьем состоянии на рис. 5.12, то так же будут двигаться и экземпляры испущенного фотона; в этом случае у него будет круговая поляризация. Общий вид эллиптической поляризации возникает при перемещении экземпляров фотона «порциями», то есть при отщеплении от них дочерних экземпляров.

Введение в модель электронов как актуальных частиц не представляет существенных затруднений; мы можем либо размножать экземпляры, рассматривая дополнительные экземпляры ядер для соблюдения условия непересечения миров, либо допустить соединение в единый мир одного экземпляра ядра и нескольких экземпляров электронов, получая иерархию сетей. Диссоциация является обратным процессом, рассмотрение которого уже не будет представлять затруднений.[39]

5.15.4. Конструктивная трактовка соотношения неопределенностей

Соотношения неопределенностей $\Delta x\ \Delta p = h,\ \Delta t\ \Delta E = h$ типа координата–импульс и время–энергия входят в основания стандартной квантовой теории. Мы должны дать им конструктивную трактовку. Для первого соотношения конструктивная трактовка вытекает из доказанного соответствия динамического диффузионного роя уравнению Шредингера. Она заключается в том, что для точного определения импульса экземпляров роя надо собрать эти экземпляры с большой (по соответствующей координате) пространственной области.

Рассмотрим второе соотношение неопределенностей энергии–времени. Можно сказать, что для точного определения энергии роя необходимо большое время, и это будет правильно. Однако время представляет собой особую величину. В конструктивизме эта величина есть число шагов моделирующего алгоритма. Мы видели, что время в конструктивизме бывает двух типов: физическое и административное. Первое представляет собой число кадров видеофильма для пользователя. Второе есть внутреннее время, которое тратит алгоритм на создание фильма. Представим себе, что длительность фильма составляет T. На каждом шаге мы можем совершить ошибку ϵ в определении сценария. Тогда суммарная ошибка будет составлять максимум $T\epsilon$, так как в силу линейности квантовой теории ошибки в самом худшем случае должны складываться. Таким образом, чтобы получить правдивый сценарий для T шагов, точность определения сценария для одного шага должна составлять $1/T$. Это означает, что для построения правдивого видеофильма большой длительности мы должны тратить на обработку каждого кадра большое время. Обработка кадра означает, что мы определяем, что в нем происходит, то есть какие частицы и куда перемещаются. Для построения такого детального сценария необходимо очень

[39] Грубое приближение волновых функций двумя экземплярами использует ту же идею, что и метод регуляризации А. Н. Тихонова для решения некорректных задач(см. [67]): если начальные условия или правая часть заданы неточно, то основной оператор также следует задавать неточно. В задачах рассеяния структурных частиц не может быть точного задания их начальных состояний.

точное распределение событий во времени. Это — административное время, которое алгоритм тратит на подготовку кадра, то есть пользователь не видит всей этой работы.

А теперь посмотрим, что произойдет, если пользователь захочет узнать, какие энергии при этом имеют участвующие частицы. Это означает, что пользователя интересует физический процесс, происходящий в одном кадре фильма, который он созерцает. Но тогда административное время нашей модели превращается в реальное физическое время. Если у нас была очень точная детализация событий во времени, то из соотношения неопределенностей энергия–время следует, что энергия будет неопределенной. Мы получаем очень серьезный вывод. Если мы хотим видеть содержательный фильм большой длительности, мы должны отказаться от знания точных энергий частиц, участвующих в данном процессе. Чем более содержательный фильм мы видим, тем меньше мы знаем о энергиях, и наоборот.

Главным для нас является построение видеофильма. Поэтому вычисление энергий должно носить только вспомогательный характер и служить для нахождения правильного сценария для каждого кадра видеофильма. Например, соблюдение закона сохранения энергии в реакциях КЭД обеспечивается излучением или поглощением фотонов. Эти фотоны, с свою очередь, могут нам потребоваться только в связи с тем, что они опять где-то излучаются или поглощаются. Связи между их экземплярами создают свойства сети, классическое электромагнитное поле, и т. д., то есть влияют на очередные динамические сценарии. Таким образом, роль законов сохранения состоит только в том, какую они оказывают помощь в создании динамических сценариев для компьютерной реализации. При этом история конкретных частиц, участвующих в этих сценариях, часто бывает нам безразлична. Например, при ассоциации молекул нам нужно только знать, что излишек энергии уносится экземплярами фотонов, но их дальнейшая судьба нас не интересует. Тем не менее, если вдруг возникнет необходимость в учете этих частиц для более сложного сценария, мы всегда можем с легкостью включить их в рассмотрение.

5.16. Особенности описания КЭД с помощью сети

5.16.1. Связь фотонов с запутанностью

Все, сказанное про моделирование с использованием понятия сети, остается справедливым и для того случая, когда одним из типов рассматриваемых реальных частиц являются фотоны. Но фотоны отличаются от частиц с ненулевой массой тем, что именно они переносят электромагнит-

ное взаимодействие, то есть создают тот потенциал V, который фигурирует в уравнении Шредингера в обычной квантовой механике. Правильное сетевое описание фотонов должно основываться на следующем рассуждении, которое мы воспроизводим здесь по книге [17].

Рассмотрим две движущиеся заряженные частицы без спинов (условно можно считать их двумя электронами без учета спинов) и обозначим соответствующие им токи $j = e\,v$ через j^a и j^b (e — заряд, v — скорость), компоненты которых обозначаем с помощью нижних индексов. Их электромагнитное взаимодействие состоит в том, что они обмениваются фотонами с амплитудой, которая находится по фейнмановскому правилу. Мы используем здесь не векторы в R^3, а векторы в R^4, для которых (псевдо)скалярное произведение определяется как

$$a \cdot b = -a_1 b_1 - a_2 b_2 - a_3 b_3 + a_4 b_4. \tag{5.44}$$

Будем пользоваться тем, что полет фотона вносит вклад в амплитуду, равный $1/q^2$, где $q = (Q, \omega)$ — его импульс, так что ω есть частота, Q — трехмерный импульс. Такое соглашение ниоткуда не вытекает; оно берется только для того, чтобы у нас получилось уравнение Дирака,[40] то есть в конечном счете — уравнения Максвелла. При этом в [17] используется эвристика коллективного поведения, которая не формулируется там явно (например, используется аналогия заряженной частицы с источником реальных частиц, разлетающихся во все стороны). Но из таких предпосылок вытекает закон Кулона и определение релятивистских поправок к этому закону.

Итак, используем фейнмановское правило для нахождения амплитуды процесса испускания–поглощения фотона. Получаем, что если наши частицы обмениваются одним фотоном с импульсом q и поляризацией ϵ, то вклад этого обмена в амплитуду будет $j^a_\mu(q)\epsilon_\mu \frac{1}{q^2} j^b_\mu(q)\epsilon_\mu$, где молчаливое суммирование по μ происходит с использованием знаков, как в (5.44). Пусть импульс фотона направлен по третьей координатной оси (четвертая, как обычно — время). Тогда мы получим выражение для амплитуды в виде

$$\Delta\lambda = \frac{1}{\omega^2 - Q^2}(j^a_4 j^b_4 - j^a_3 j^b_3 - j^a_2 j^b_2 - j^a_1 j^b_1), \tag{5.45}$$

[40] Оно имеет вид $m\Psi = \sum_j p_\mu \gamma_\mu \Psi$, где спинор $\Psi = \binom{u}{v}$ содержит 4 компоненты, соответствующие направлениям спина, например, $u = \binom{u_1}{u_2}$, 4 мерные матрицы γ_μ имеют вид $\binom{0\ -\sigma}{\sigma\ 0}$, где σ — 4-вектор, составленный из матриц Паули, а p — 4-вектор энергии–импульса.

где Q есть трехмерный импульс фотона. Первые два члена дадут нам кулоновское поле, а вторые два — вклад поперечных фотонов. Используя сохранение тока $q_\mu j_\mu(q) = 0$, получаем $\omega j_4 = Q j_3$, что дает нам общее выражение для амплитуды взаимодействия двух зарядов

$$\Delta\lambda = -\frac{j_4^a j_4^b}{Q^2} - \sum_{\omega^2 \approx Q^2} (\omega^2 - Q^2). \tag{5.46}$$

Заметим, что здесь мы имеем право проводить суммирование именно потому, что мы не в состоянии различить вклады в процесс от разных фотонов: фотоны исчезают в нем!

Четвертая координата в векторе тока есть плотность заряда. Поэтому мы теперь перейдем в пространственно-временные координаты в гильбертовом пространстве состояний с помощью

$$j_4(Q, \omega) = \int \rho(x, t) \exp(-i(Qx - \omega t)) d^3x dt$$

и найдем вклад в амплитуду от первого слагаемого в (5.46). Интегрирование по $d\omega$ даст $2\pi\delta(t_a - t_b)$, то есть взаимодействие, обусловленное первым вкладом, должно быть мгновенным. Интегрирование же по d^3Q даст $-\frac{4\pi}{|x_a - x_b|}$. Таким образом, у нас получается мгновенное кулоновское взаимодействие. Так же можно найти вклад поперечных фотонов, происходящий из последнего слагаемого в (5.46), что даст запаздывающее взаимодействие, то есть распространяющееся со световой скоростью действие поперечных фотонов. Из него вытекает закон Ампера взаимодействия токов, если рассматриваемые заряды будут двигаться не в вакууме, а в проводнике, и испытывать столкновения с его частицами (см. ниже).

Такое рассуждение, некорректное со стандартной аналитической точки зрения, можно сделать корректным в конструктивизме, считая, что Q^2 и $\omega^2 - Q^2$ отделены от нуля некоторым порогом $\epsilon > 0$. Это даст уточнение динамики нитей, связывающих экземпляры фотона. Мы должны установить, что передача импульса вдоль такой нити происходит практически мгновенно, хотя сами экземпляры двигаются со скоростью света. Передача же импульса перпендикулярно фотонной нити происходит со скоростью света, то есть не мгновенно. Мы также должны признать, что кулоновское взаимодействие распространяется вдоль фотонных нитей, а то, что называется обменом поперечными фотонами — перпендикулярно. Если фотонную нить можно представить себе в виде струны, натянутой между двумя экземплярами заряженных частиц, то поперечный фотон, для которого $\omega \approx |Q|$

надо представлять себе как поперечную волну, распространяющаяся вдоль этой струны.

Информацию нельзя передавать, используя продольные фотоны, так как эти фотоны создают просто натяжение нити, но не ее колебания (они всегда поперечны). Информация передается только колебаниями, то есть поперечными, или реальными, фотонами, у которых векторы электрического и магнитного поля вместе с импульсом образуют ортогональный базис в R^3. В свете такого представления фотонов мы можем, строго говоря, вообще не считать их реальными частицами, если это не диктуется технической необходимостью модели (например, удобством ее программной реализации). Их существование как изолированных частиц можно представлять себе просто как свойства связей между экземплярами двух заряженных частиц. Например, обрыв нити, соответствующей электрону, при его падении на протон, представляемый в терминах динамики этой нити (самое простое — обрыв при превышении порога δx расстояния между соседними экземплярами), и есть критерий испускания фотона, порождающего соответствующую отдачу на экземпляры электрона и связанные с ними экземпляры протона.

В таких терминах мы можем представить различие между полем и отдельными фотонами. Рассуждение, приведенное выше, показывает, что поле получается, когда его источник составляет запутанное состояние многих частиц; в терминах коллективного поведения их экземпляры должны быть связаны связями. Мы видели, что это связи, по которым распространяется мгновенное кулоновское взаимодействие, что означает, что во всех экземплярах, участвующих в них, — одинаковое время.

Если же у нас есть источники отдельных фотонов (например, миллион лазеров), таких связей между источниками фотонов нет, и, значит, время у всех этих источников различное. Тогда становится понятным, почему поле должно действовать гораздо сильнее, чем отдельные фотоны. Будем в качестве атрибутов экземпляров учитывать время, а не только координаты в пространстве. Тогда в случае поля у нас есть большие компоненты связности сети по собственным связям, поскольку время одинаково, а в случае отдельных фотонов таких компонент связности нет, так как время у источников разное (см. рис. 5.13)! Если рассматривать сети как реальные механические, это приведет как раз к тому, что в случае отдельных n фотонов их действие будет в n раз меньше, чем в случае поля из n фотонов, как это и предсказывает квантовая механика (см. приведенное выше рассуждение из книги [17]). Таким образом, именно связи между экземплярами фотонов порождают силовые эффекты поля, вытекающие из наличия у него классической напряженности. Заметим, что такие связи могут формироваться

не только из готовых связей между атомами кристаллической решетки проводника с током, но и, например, при взрывных процессах, когда большие ансамбли испускающих частиц оказываются связанными с помощью короткоживущих указателей.

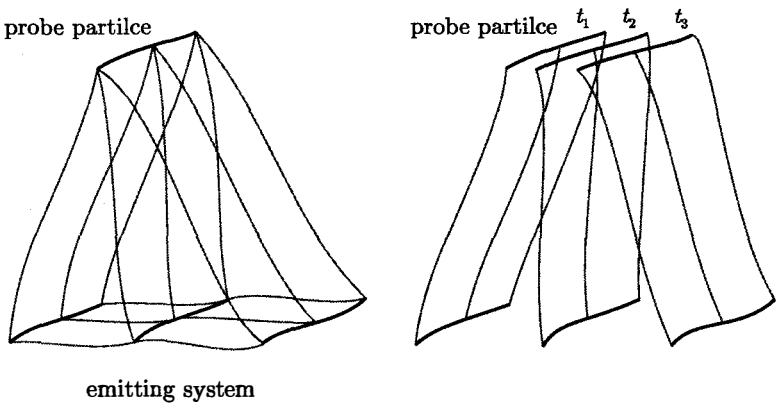


Рис. 5.13. Поле и отдельные фотоны

Конечно, эти рассуждения невозможно использовать для непосредственного получения численных оценок. Их цель — показать пригодность языка коллективного поведения для построения алгоритмов, согласованных со стандартной квантовой физикой.

Но эта модель не может дать нам закона Ампера взаимодействия токов. Предположим, что два наших электрона движутся параллельно друг другу с одинаковой скоростью. Тогда между ними должна действовать только кулоновская сила. Действительно, обмен поперечными фотонами будет невозможен по причине того, что они не будут испускаться при равномерном и прямолинейном движении. Если мы перейдем к системе координат с началом в их центре масс, они будут покоиться в ней, и единственной силой, действующей между ними, будет кулоновская, проистекающая из обмена продольными фотонами. В каком случае будет происходить обмен поперечными фотонами? Это будет иметь место только тогда, когда электроны движутся с ускорением. Такое ускорение, в свою очередь, может быть вызвано только одной причиной в рамках КЭД: их взаимодействием с некими посторонними продольными фотонами, то есть каким-то кулоновским полем. Например, если один из электронов будет притягиваться положительно

заряженным атомным ядром, и, испытав ускорение, испустит поперечный фотон согласно фейнмановскому правилу.

А теперь рассмотрим другую ситуацию: электрон, движущийся в проводнике под действием приложенного к нему напряжения. Такой электрон будет испытывать постоянные соударения с атомами решетки, где каждое соударение означает действие отталкивающего потенциала со стороны других электронов, которые окружают ядра атомов этой решетки. Соударения будут происходить, даже если скорость электрона равна нулю, просто за счет расплывания его волновой функции (см. выражение для ядра (4.19)). Мы можем представить это как движение электрона в полой трубке, при котором он сталкивается с ее стенками. Стенка образована сетью экземпляров составляющих ее ядер и электронов, то есть, с точки зрения стандартной квантовой теории, она находится в запутанном квантовом состоянии типа GHZ. Поэтому излучаемые при этих столкновениях экземпляры фотонов будут связаны одной общей нитью. Это соответствует тому, что невозможно определить, какое столкновение электрона породило данный фотон. В этом случае, как мы видели, амплитуда испускания фотона будет равна сумме волновых функций фотонов $\sum_j \phi_j$, что и будет давать нам векторный потенциал электромагнитного поля, создаваемого проводником. В терминах сети это означает, что из-за наличия нити, связывающей экземпляры ядер и электронов проводника, все экземпляры фотонов также будут связаны одной нитью, и это дает нам возможность складывать именно амплитуды, а не вероятности; если бы мы складывали вероятности, получаемое поле надо было бы разделить на число всех фотонов, что уменьшило бы его во много раз.

Итак, сетевое описание электромагнитного поля существенно определяется наличием нити, связывающей экземпляры излученных фотонов: эта нить не может образоваться сама по себе, она может только наследоваться от той нити, которая связывала экземпляры ансамбля, излучившего эти фотоны. Более того, само разделение этой единой нити на отдельные фотоны довольно условно, так как непосредственному детектированию подлежит только механическое колебание, вызываемое контактом с этой нитью в большом ансамбле. Если бы вместо проводника с током мы взяли очень много лазеров, то нам не удалось бы создать такого же поля, поскольку в это случае мы получили бы единичные фотоны, а не цельную нить, и поле было бы, соответственно, гораздо слабее.

5.16.2. Фотонные нити

Теперь рассмотрим те следствия, которые дает нам понятие нити, связывающей экземпляры фотона, и как они помогают избавиться от неко-

торых трудностей в КЭД, возникающих вследствие применения классической математики. Одна из трудностей состоит в невозможности корректного представления поля в виде потока точечных частиц. Формально ее можно с легкостью обойти, не рассматривая эти точечные частицы вообще, как по традиции и делается. Тем не менее, такое представление поля как потока точечных частиц служит единственным источником эвристики для КЭД, а в многочастичных задачах роль эвристики такова, что традиционный прием в этом случае создает серьезные препятствия. Суть трудности в следующем. В предыдущем параграфе мы видели, что кулоновское (скалярное) поле должно распространяться мгновенно, что с очевидностью делало бы возможными мгновенные дальние коммуникации. Именно это делает невозможным точечное представление поля.

При использовании фотонных нитей подобная трудность не возникает. Импульс вдоль нити, передающий кулоновское поле (это называется в КЭД продольными фотонами), действительно, может распространяться сколь угодно быстро. Однако его невозможно использовать в качестве носителя пользовательской информации, так как она может передаваться только при перемещении самой нити. Сама же нить перемещается в результате поперечных перемещений ее экземпляров (что соответствует поперечным фотонам). Можно считать, что поперечная волна вдоль нити означает разматывание новой нити, направление которой примерно совпадает с направлением старой, и такое разматывание происходит со скоростью перемещения экземпляров фотона, то есть со световой. Поэтому, если в некоторой точке пространства происходит распад нейтрального тела на две противоположно заряженные частицы, которые с большой скоростью разлетаются, то в удаленной на расстояние s точке эффект от изменения кулоновского поля будет доступен только через время s/c, а не мгновенно, как было бы при отсутствии нитей.

Вторая трудность связана с расходимостью ряда для амплитуды, показанного на рисунке процесса с излучением двух фотонов. Рассмотрим эту ситуацию в терминах нитей экземпляров заряженной частицы, испускающей фотоны. Тогда испускание фотона и поглощение того же самого фотона частицей надо трактовать как передачу импульса вдоль нити. При этом никакого реального фотона не существует, а в передаче только задействуется участок нити между двумя соседними экземплярами частицы. Реальный же фотон, который можно детектировать, представляет собой нить своих экземпляров, отделившуюся от нити частицы. Таким образом, диаграмма, приводящая к расходимости в КЭД, будет в языке коллективного поведения запрещенной. Между испусканием и поглощением фотона той же частицей не может происходить никаких других событий, связанных с излучением или поглощением фотонов.

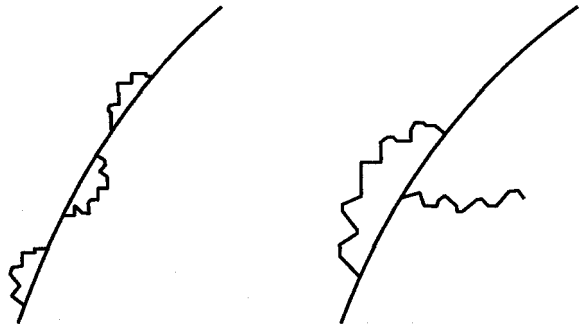


Рис. 5.14. Разрешенные и запрещенные диаграммы в методе коллективного поведения

5.17. Краткий обзор приложений метода коллективного поведения

Мы установили, что моделирование квантовой эволюции с помощью роя с экземплярами, объединенными в неперекрывающиеся кортежи, дает приближение унитарный динамики при числе экземпляров каждой квантовой частицы, стремящемуся к бесконечности. Фактически, модель многочастичной квантовой системы представляется нам теперь в виде двумерной сети вида, изображенного на рисунке 5.15. Здесь в каждом столбце стоят экземпляры одной квантовой частицы, а в каждой строке стоит квантовый мир, состоящий из экземпляров от каждой реальной частицы — по одному. Градиентное действие роя на тонкий слой и обратная отдача импульса происходит по каждой реальной частице для близких миров, а кулоновская потенциальная энергия действует только в пределах каждого мира по отдельности, то есть экземпляры испытывают влияние потенциала только тех экземпляров, которые входят с ними в один мир.

Динамика, которая задается такой сетью, отличается от унитарной только в той степени, в которой число кортежей (равное числу всех экземпляров любой из реальных частиц) не бесконечно. При росте числа реальных частиц происходит стремительный отход динамики сети от унитарной динамики, определяющейся уравнением Шредингера. Это и представляет собой абсолютную модель декогерентности, при которой недостаток классической памяти для записи квантовых состояний трактуется как декогерентность. Однако данной модели еще не достаточно для построения моделирующих алгоритмов. Мы должны как-то определить, сколько

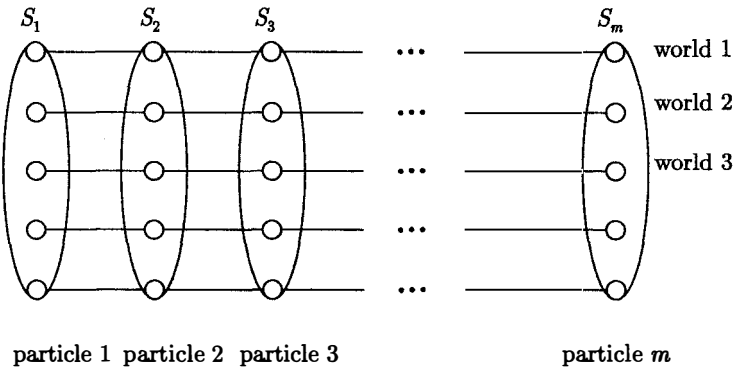


Рис. 5.15. Сеть, представляющая систему m квантовых частиц

экземпляров реальных частиц нам требуется, то есть каково действительное значение n. Можно считать, что определение действительного значения параметра n в природе представляет собой чисто физическую задачу, допускающую точное решение. Оно пока не известно. Но можно утверждать, что знание значения n числа экземпляров может прийти только от наблюдения за реальными динамическими сценариями, построенными с помощью сетей. Более того, значение n может зависеть от моделируемого процесса в следующем смысле. Процессы с малой длиной кортежей $s_1, s_2, \ldots, s_m$ могут описываться большими значениями n, а процессы с большим значением m — наоборот, малыми значениями n. В любом случае все определяется возможностью построения динамического сценария в большей степени, чем сравнением с известными физическими константами.

Что нового дает роевое представление для описания многих тел по сравнению со стандартным формализмом квантовой теории? Новая возможность состоит в том, что запутанность получает непосредственное представление в форме кортежей вида $s_1, s_2, \ldots, s_m$, которые состоят из отдельных экземпляров всех частиц, объединенных связями. Мы можем назвать связями объекты, которые объединяют экземпляры реальных частиц в кортежи — квантовые миры. Такие объекты не имеют аналогов в стандартном формализме, где нет и экземпляров. Стандартное рассмотрение определяет запутанность как невозможность представления вектора состояний в виде тензорного произведения векторов состояний отдельных частиц, и только. С таким определением «от противного» невозможно работать иначе, чем применяя стандартные приемы матричной алгебры, в которых декогерентность является инородным элементом и потому не допускает никакого первопринципного анализа. Между тем есть все основания считать за-

путанность таким же физическим ресурсом, как и сами реальные частицы, то есть приписывать ей некоторый объект, с которым можно манипулировать непосредственно. Эту возможность нам дает только конструктивизм. В эвристике коллективного поведения мы можем ввести правило обрыва длинной связи при превышении некоторого порога условной нагрузки на эту связь. Другая форма работы со связями заключается в их отборе. Отбор квантовых состояний должен производиться так. Кортежи-миры мы можем сгруппировать в отдельные группы $\Gamma_1, \Gamma_2, \ldots, \Gamma_l$, так что в одну группу попадут только кортежи, расположенные близко друг к другу в конфигурационном пространстве для m частиц. После этого мы можем ликвидировать группы с малым числом элементов, перераспределяя связи между оставшимися экземплярами в соответствии с максимальной близостью к мирам из больших групп. Такой принцип квантового отбора можно интерпретировать с помощью степени конструктивности интерференции амплитуд.

Соответствующее рассуждение можно провести и для электромагнитного поля. Представим себе, что у нас имеется группа атомов, которые могут излучать фотоны. Есть две возможности:

- изменение состояния атома, излучившего фотон, позволяет идентифицировать его среди других атомов группы;
- изменение состояния атома, излучившего фотон, перераспределяется на все атомы группы, и такой атом невозможно идентифицировать.

Пусть ψ есть амплитуда, которую несет излученный фотон, Ψ — состояние группы атомов. Будем приписывать излучающему атому индекс j и считать, что амплитуды λ_j излучения каждым атомом j примерно одинаковы. Пусть нулевое значение $j = 0$ отвечает случаю, когда фотон вообще не испускается. В первом случае состояние всей системы атомов и фотонов опишется общей волновой функцией вида

$$\sum_j \lambda_j |\psi_j\rangle |\Psi_j\rangle, \tag{5.47}$$

а во втором —

$$\sum_j \lambda_j |\psi_j\rangle |\Psi\rangle = |\psi_{general}\rangle |\Psi, \tag{5.48}$$

где $|\psi_{general}\rangle = \sum_j \lambda_j |\psi_j\rangle$ — некоторое состояние фотона. Оценим вероятность излучения фотона в этих двух случаях. В первом она будет равна

$$\sum_{j \neq 0} |\lambda_j|^2, \tag{5.49}$$

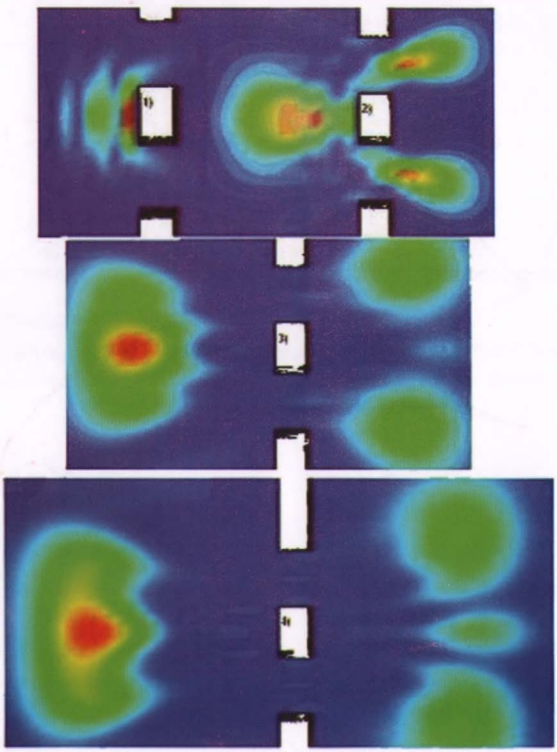


Рис. 5.3. Интерференция частицы на двух щелях. Метод волновых функций. (Визуализация И. А. Семенихина, рисунок с сайта http://qi/cs/msu/su)

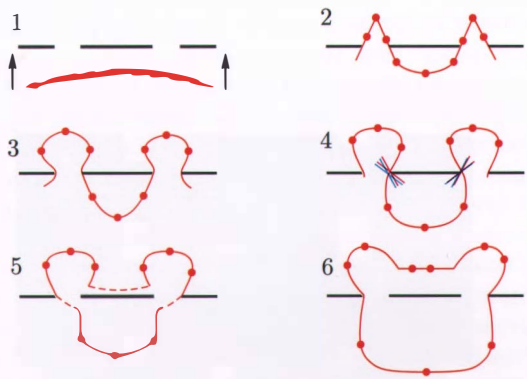


Рис. 5.4. Интерференция частицы на двух щелях. Метод коллективного поведения

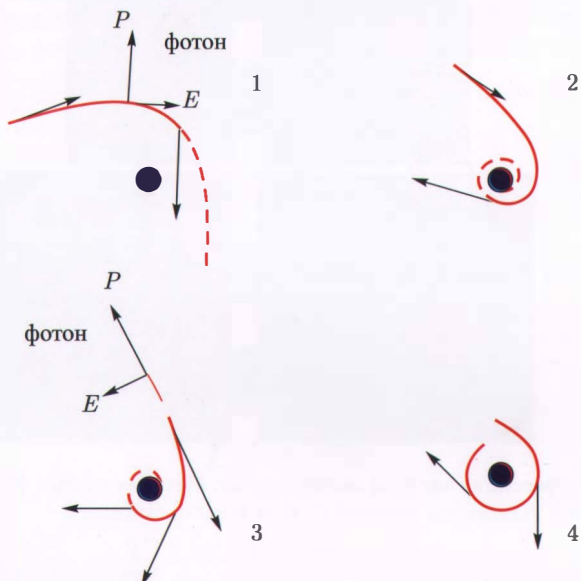


Рис. 5.5. Падение электрона на протон. Электрон представлен красной нитью. Пунктиром показано, как двигалась бы нить, если бы не было эмиссии фотона. На шаге 1) эмиссия тормозит электрон, на шаге 3) ускоряет, не давая упасть на протон. Вектор поляризации экземпляра фотона параллелен касательной к нити в той точке, в которой в результате его эмиссии меняется траектория нити

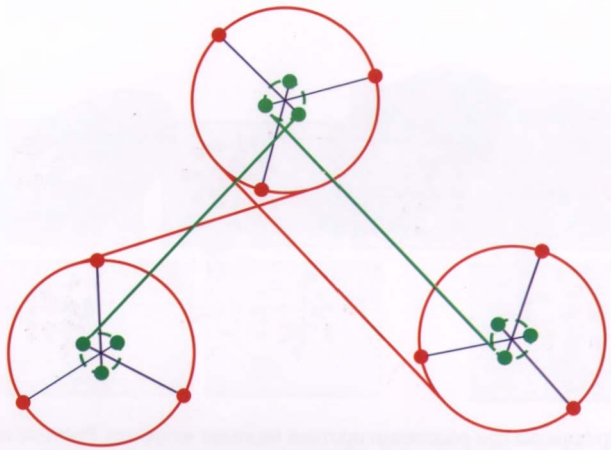


Рис. 5.6. Сеть для атома водорода. Связи между экземплярами электрона и протона (условное изображение результатов воображаемого пошагового моделирования

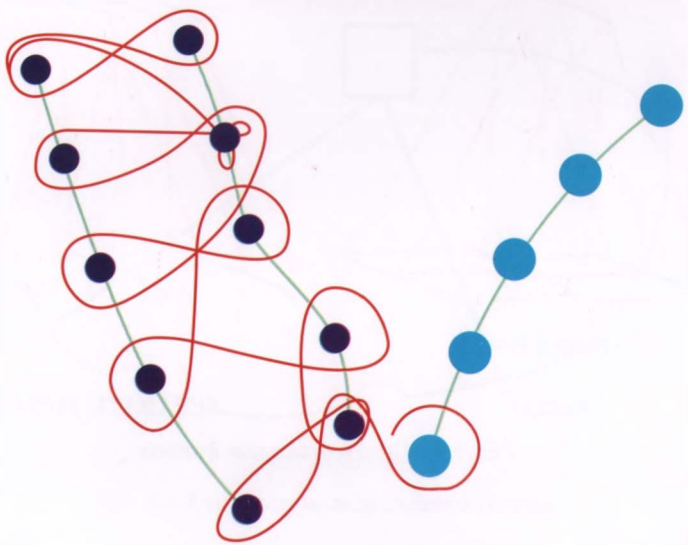


Рис. 5.7. Динамика сети в реакции $H_2 + O \rightarrow H_2O$. Показана нить одного электрона

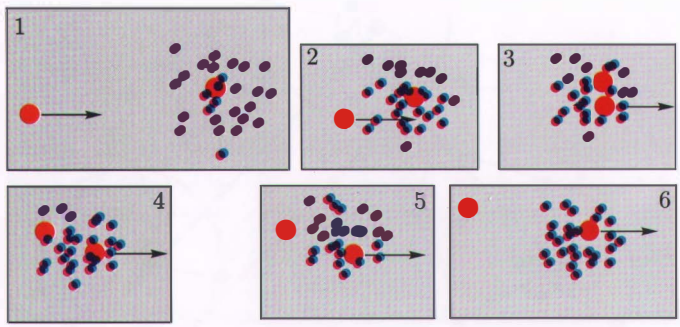


Рис. 5.8. Перезарядка при рассеянии протона на атоме водорода. Рисунок из статьи [28]

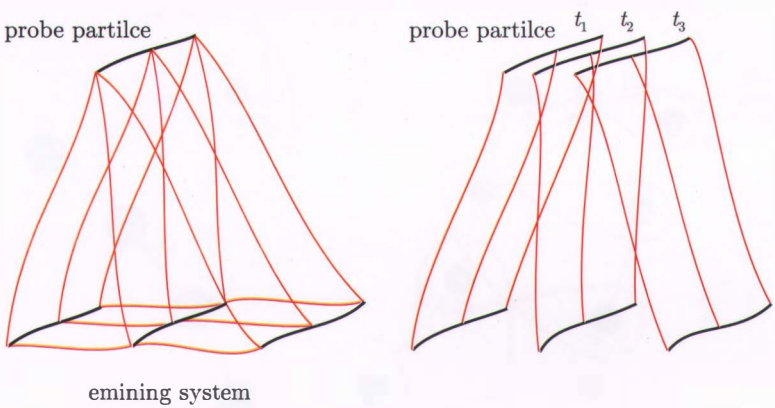


Рис. 5.13. Поле и отдельные фотоны

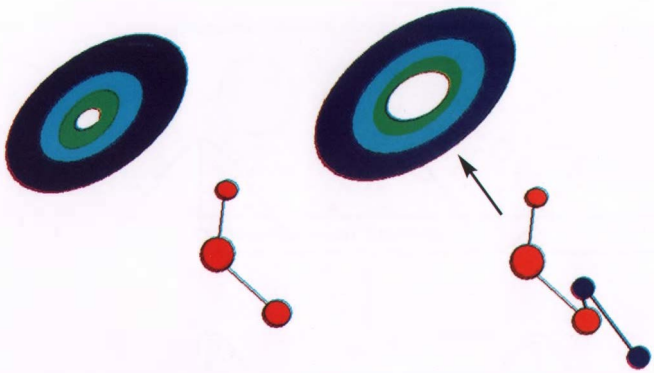


Рис. 6.1. Проникновение транспортной молекулы через пору в клеточной мембране

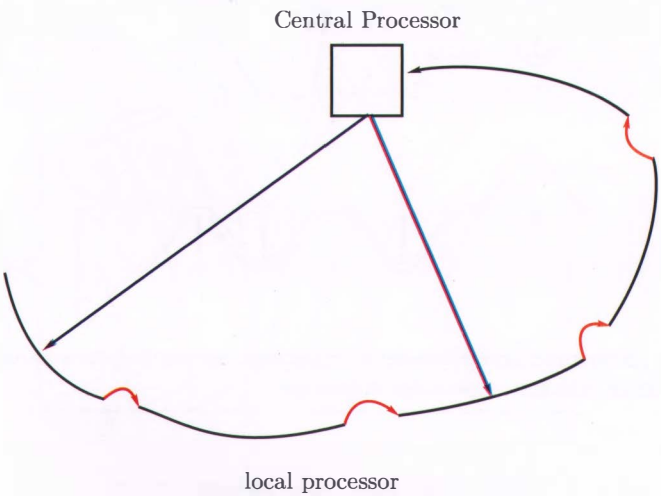


Рис. 6.2. Структура модели сложной системы

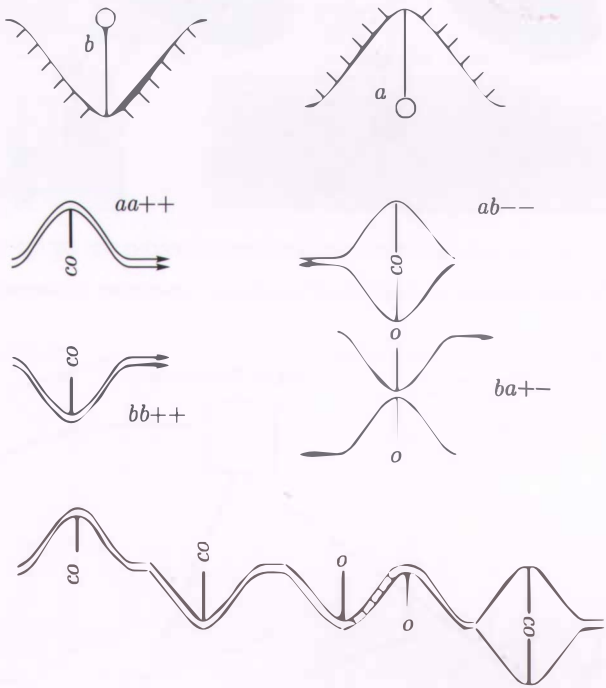


Рис. 6.3. Наложение двух полимеров. Красным цветом показана линейная связь, зоны склейки показаны короткими штрихами

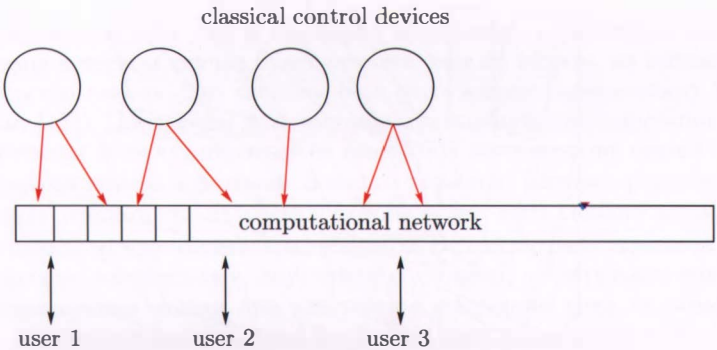


Рис. 6.4. Конструктивная схема квантового компьютера

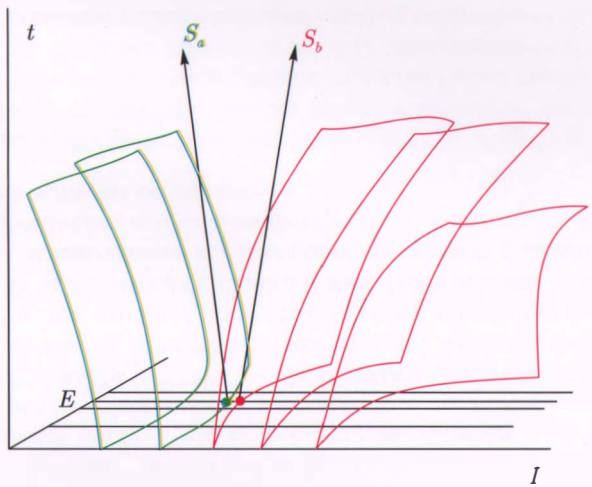


Рис. 7.1. Критические экземпляры модели

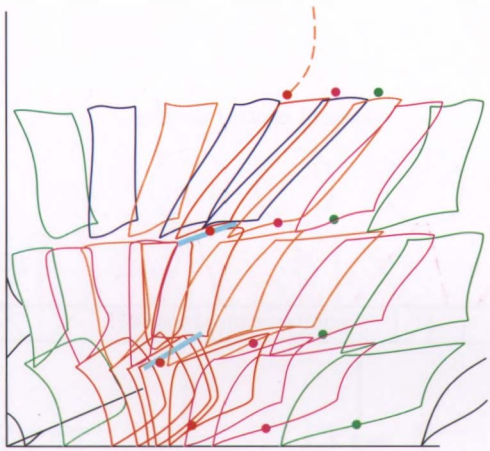


Рис. 7.2. Эволюция, заданная выбором критических генов. Голубым цветом изображено изменение кортежа при селекции

а во втором —

$$|\sum_{j\neq 0}\lambda_j|^2. \qquad (5.50)$$

Поскольку все λ_j при $j \neq 0$ примерно одинаковы, вероятность испускания фотона в первом случае будет меньше, чем во втором, во столько раз, сколько всего атомов. Это качественное рассуждение принадлежит Фейнману (см. [17]). Попробуем дать ему конструктивную интерпретацию. Эта интерпретация должна опираться на введенное нами понятие связей между экземплярами атомов и фотонов. В наших терминах перераспределение отдачи между атомами при излучении фотона может быть связано только с наличием связей между экземплярами атомов. В стандартных терминах такие атомы должны находиться в запутанном состоянии; но детальное описание перераспределения отдачи при запутанном состоянии вряд ли возможно, так как именно для такой задачи необходим квантовый компьютер. В конструктивной эвристике можно рассуждать проще. Запутанность означает наличие постоянных связей между экземплярами отдельных атомов. Тогда перераспределение импульса отдачи в каждом мире с такими связями объясняется наличием некоего подобия упругой связи между экземплярами этого мира. Это свойство упругости не есть дополнительный элемент реальности, а представляет собой главное свойство самих связей; например, оно обеспечивает интерференционные свойства молекулы, когда ее состояние описывается волновой функцией типа GHZ: $\sum_{\bar{j}}\lambda_{\bar{j}}|\Psi_{j_1}\rangle|\Psi_{j_2}\rangle\ldots|\Psi_{j_k}\rangle$, где $|\Psi_j\rangle$ есть состояния ее атомов.

Итак, вероятность испускания фотона резко повышается при наличии связей между экземплярами испускающих его атомов. Рассмотрим теперь разницу между отдельными фотонами и электромагнитным полем. Эта разница состоит в том, что поле представляет собой множество фотонов, объединенных связями. В стандартном формализме волновая функция фотонов — в нашем примере $|\psi_{general}\rangle$ — представляет собой (после надлежащей перенормировки) напряженность классического электромагнитного поля. В первом случае, когда у нас есть отдельные фотоны, говорить о поле можно только условно, то есть после детектирования конкретного фотона, и это поле очень маленькое. Во втором случае, когда отдача от фотонов перераспределяется, у нас есть значительная величина — амплитуда фотонов, которая проявляет себя классически. Это — стандартное описание излучения. Мы видим, что оно двойственно: в случае поля мы не можем говорить о вероятности, а только о поле, измеряемом классически, тогда как в случае отдельных фотонов мы говорим именно о вероятностях. Стандартный

подход не позволяет нам применить единого языка для описания излучения в случаях отдельных фотонов и поля. Это — характерная особенность классического формализма.

В конструктивном формализме обе ситуации — с отдельными фотонами и полем — описываются единообразно. Поле отличается от набора отдельных фотонов только наличием связей между их экземплярами. То, что мы ранее назвали упругими свойствами этих связей, обеспечивает наблюдаемость поля классическими средствами. Важно подчеркнуть, что связи не являются материальными объектами, — это всего лишь математическая абстракция, присутствующая в конструктивном варианте многочастичной квантовой механики. Поэтому бессмысленно задавать вопросы об их массе, и т. п. Точно так же то, что мы назвали упругостью связей, не есть обычная упругость, которая подчиняется закону Гука. Это лишь эвристический прием, позволяющий рассмотрение не всего роя, а только его тонкого слоя. При этом действие градиента плотности роя на тонкий слой представляется в виде упругости нити, связывающей экземпляры тонкого слоя. Это должно помочь решить главную задачу конструктивной квантовой теории: создание работающих моделей динамики.

Вернемся к движению вязкой жидкости под действием силового поля, которое в классическом приближении описывается уравнением Навье–Стокса (3.7). Это уравнение формально не содержит эффекта связей между экземплярами ее атомов, то есть существования запутанных состояний между ними.[41] Между тем, образование и распад таких состояний может иметь принципиальное значение для возникновения турбулентности, то есть быстрого формирования вложенных сложных вихрей. Действительно, неустойчивое поведение решений уравнения (3.7), а также его обобщения для сжимаемых сред, говорит о том, что решающее значение для дальнейшего поведения играют изменения скорости в очень малых объемах за очень малые временные отрезки, для которых как раз необходимо пользоваться квантовыми, а не классическими представлениями.

Как может быть устроена динамика связей в момент образования вихрей? Представим себе два регулярных потока, сталкивающихся на некоторой плоскости π с одновременным образованием нескольких вихрей. Тогда наиболее естественной формой его описания будет квантовая перестройка связей, происходящая в очень коротком интервале времени (см. рис. 5.16). Сами связи могут жить очень короткое время, но этого как раз достаточно для возникновения турбулентного движения. Например, наличие связей,

[41] Хотя его нельзя строго вывести из столкновительной динамики отдельных частиц; это, возможно, является указанием на фундаментальную роль запутанных состояний в реальной динамике сплошных сред.

перпендикулярных к плоскости рисунка, обеспечивает возникновение выделенных осей вращения в трехмерном потоке, который при классическом приближении будет первоначально изотропным в плоскостях, параллельных π.

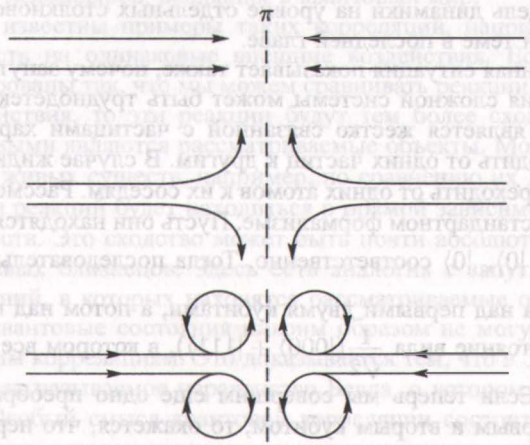


Рис. 5.16. Формирование связей вдоль линий течения как начало вихрей

Формирование связей кольцевого типа приводит к образованию зачатков вихрей, растущих до наблюдаемых размеров. При этом не возникает очень больших скоростей самих атомов в жидкости, так как наличие связи уже дает эффект скорости на очень малых расстояниях; аналогичное явление в случае спиновых состояний мы уже рассматривали. Отметим, что при возникновении вихрей возникает неравноправие направлений на плоскости π, которое возникает благодаря связям, ортогональным к ней; это приводит к формированию вихрей с разными направлениями осей вращения, что характерно для турбулентности. В случае двумерных потоков такого эффекта не возникнет. Таким образом, движения именно в трехмерном пространстве приводят к возникновению турбулентности. Этот факт хорошо известен из исследований самого уравнения (3.7).

Запутанные состояния, по-видимому, требуется учитывать при получении уравнения (3.7) непосредственно из столкновительной динамики отдельных атомов. Образование и распад запутанности между отдельными атомами в течение коротких промежутков времени может быть ответственно за поведение жидкости вне зоны турбулентности, когда ее динамика хорошо описывается этим уравнением. Для точного учета роли запутанности необходимо применять модель сети прежде всего к динамике жидкостей,

где время существования собственных связей сравнимо со временем свободного пробега атомов; в этом случае влияние связей может быть существенным в макроскопическом масштабе и взаимодействовать на среднюю скорость, давление и плотность жидкости. Введение механизма связей подразумевает модель динамики на уровне отдельных столкновений. Мы еще вернемся к этой теме в последней главе.

Рассмотренная ситуация показывает также, почему запутанность квантового состояния сложной системы может быть труднодетектируемой. Запутанность не является жестко связанной с частицами характеристикой, и может переходить от одних частиц к другим. В случае жидкости запутанность может переходить от одних атомов к их соседям. Рассмотрим систему трех кубитов в стандартном формализме. Пусть они находятся в состояниях $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, $|0\rangle$, $|0\rangle$ соответственно. Тогда последовательные операции $CNOT$ сначала над первыми двумя кубитами, а потом над первым и третьим дадут состояние вида $\frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |111\rangle)$, в котором все три окажутся запутанными. Если теперь мы совершим еще одно преобразование типа $CNOT$ над первым и вторым кубитом, то окажется, что первый и третий запутаны, а второй с ними не запутан. Таким образом, запутанность может легко переходить на совершенно другие частицы. При разнообразных взаимодействиях в сложной системе такая ситуация является правилом, и она приводит к тому, что детектировать запутанность нелегко. Во всяком случае, в сложных системах не годятся те подходы, которые применяются для детектирования запутанности отдельных ионов в ловушке или бифотонов.

Тем не менее, общая схема детектирования запутанности может быть обобщена и на случай сложных систем. Эта схема называется квантовой томографией и состоит в следующем. Допустим, мы хотим узнать, является ли запутанным квантовое состояние двух кубитов S_1 и S_2. Для этого мы должны дважды подготовить такое состояние и измерить его в базисах $E = E_1 \bigotimes E_2$ и $E' = E'_1 \bigotimes E'_2$. Если базисы выбраны так, что E_1 совпадает с E_2 и E'_1 совпадает с E'_2, то результаты измерений должны быть скоррелированными. Например, так можно отличить ЭПР-состояние $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ от любой смеси. Эту схему можно варьировать, приспособив ее под более сложные системы S_1, S_2, можно по-разному выбирать базисы E_1 и E'_1. Главное состоит в том, что при одинаковом выборе базисов должна быть корреляция результатов измерений. В конструктивной квантовой механике это свойство является характеристикой связей между экземплярами разных частиц, которая состоит в том, что при взаимодействии этих экземпляров

с другими экземплярами должна учитываться реакция всех элементов данного квантового мира. Это не означает, что реакция всех экземпляров, объединенных связями, должна быть одинаковой; она может быть, например, противоположной. Главное — наличие какой-либо корреляции такой реакции для всех экземпляров, входящих в квантовый мир.

Хорошо известны примеры таких корреляций, например, в реакции живых существ на одинаковые внешние воздействия. Если эти воздействия градуированы так, что мы можем сравнивать реакции обоих объектов на эти воздействия, то эти реакции будут тем более сходными, чем более родственными являются рассматриваемые объекты. Можно ввести степень родства живых существ, например, по сравнению их ДНК. Тогда степень сходства реакций будет находиться в прямой зависимости от степени родства существ. Это сходство может быть почти абсолютным, например, для однояйцевых близнецов. Здесь есть аналогия с запутанностью квантовых состояний, в которых находятся рассматриваемые объекты. Однако запутанные квантовые состояния никоим образом не могут быть сведены к классическим корреляциям. Это доказывается тем, что в ЭПР-состояниях нарушается так называемое неравенство Белла, о котором мы будем говорить ниже. Особый смысл квантовой корреляции состоит в том, что наблюдаемый мир устроен именно как конструктивная модель, в котором пользователь не может вмешиваться в созданный видеофильм, а должен просмотреть его с начала до конца. Его свобода воли состоит только в том, чтобы заказать системе создание такого видеофильма. В процессе создания имеют место коммуникации между пространственными точками, которые представляются пользователю как далекие, для достижения квантовой корреляции в создаваемом фильме. Эти коммуникации относятся к административной части модели, недоступной пользователю. В частности, пользователь не может применять эти коммуникации для передачи задуманной им информации из одной точки пространства в другую, так что принцип релятивизма остается в силе. Если мы примем такое ограничение понимания свободы воли как естественное, никаких препятствий для конструктивного представления запутанности в виде связей не останется. Это представление есть прямая аналогия квантовой запутанности с классической связью; мы должны принять такую трактовку, если хотим продвинуться в область сложных систем.

В стандартном математическом формализме за отмеченной аналогией ничего не стоит, то есть она является поверхностным сходством. Там действует метафизический «запрет на скрытые параметры», который означает, что в стандартном формализме нет ничего, кроме волновой функции, что влияло бы на исход измерения состояния. Этот «запрет» не является тео-

ремой; он лишь выражет идеологию копенгагенского формализма, и имеет смысл только в этом формализме.

В конструктивизме «запрет на скрытые параметры» означает недоступность пользователю модели множества элементарных исходов Ω. Как мы видели, эта недоступность вытекает из теоремы о невозможности распознавания равенства конструктивных действительных чисел, то есть имеет статус точного утверждения. На каждом шаге моделирующего алгоритма мы имеем возможность явно пользоваться только приближенным знанием об Ω, то есть (пробными) значениями координат, импульсов, общего числа экземпляров реальных частиц, а также их связей и параметров, определяющих динамику таких связей (например, максимальную длину). Это дает нам не только явную форму (приближенного) множества элементарных исходов для квантовой вероятности, но и возможность непосредственной манипуляции с нелокальными состояниями в сложных системах, настоящую роль которых еще предстоит выяснить.

Эвристика коллективного поведения применима и к квантовой электродинамике. Если в обыкновенной (нерелятивистской) квантовой теории рассматривается динамика волновой функции $|\Psi(t)\rangle$, где физическое время t является общим параметром, то в релятивизме ситуация иная. Здесь у нас имеется состояние вида $|\bar{\Psi}\rangle$, находящееся со временем в следующем отношении. Есть так называемое внутреннее время t квантовой системы, а есть другое, внешнее время τ. Эволюция, доступная для наблюдения пользователем модели, есть последовательность унитарных операторов в пространстве состояний $\mathcal{H}$ вида

$$|\bar{\Psi}_{\tau=0}\rangle \to |\bar{\Psi}_{\tau=1}\rangle \to \ldots \to |\bar{\Psi}_{\tau=l}\rangle, \tag{5.51}$$

называемых рассеяниями. Эта цепочка эволюции квантового состояния во внешнем времени τ, промежутки которого мы обозначаем натуральными числами и выбираем так, чтобы данная последовательность состояний давала нам реалистическую картину, например, химической эволюции. При этом каждое состояние $|\bar{\Psi}_{\tau=j}\rangle = |\bar{\Psi}\rangle$ имеет вид

$$|\bar{\Psi}\rangle = \sum_i \lambda_i |\bar{x}_i\rangle |\bar{t}_i\rangle, \tag{5.52}$$

то есть представляется в виде линейной суперпозиции базисных состояний вида $|\bar{x}_i\rangle|t_i\rangle$. Одно такое базисное состояние означает, что рассматриваемая система находится в точке $\bar{x}_i = (x_i^1, x_i^2, \ldots, x_i^n)$ конфигурационного пространства в момент внутреннего времени $\bar{t}_i = (t_i^1, t_i^2, \ldots, t_i^n)$. При этом x_i^j есть координата экземпляра j реальной квантовой частицы i в нашей

системе, t_i^j — соответствующий этому экземпляру момент времени. Таким образом, внутреннее время системы в КЭД не является единым параметром, а должно рассматриваться сходным образом с пространственной координатой. Наличие в разложении именно кортежа времени $\bar{t}_i$ есть следствие обычных правил обращения с тензорным произведением состояний $|\bar{\Psi}'\rangle$ и $|\bar{\Psi}''\rangle$ для разных частиц, при которых их состояние в случае незапутанности представляется как $|\bar{\Psi}'\rangle \bigotimes |\bar{\Psi}'\rangle$, а в случае запутанности — как суперпозиция таких состояний. Нерелятивистские состояния, в которых время общее и выносится в качестве тензорного сомножителя, могут быть только пространственно запутанными, тогда как в релятивистских состояниях нет общего внутреннего времени, и здесь может быть запутанность также и по внутреннему времени.

Выше мы уже видели, что закон сохранения энергии-импульса при фундаментальном взаимодействии заряженных частиц с фотонами влечет наличие общего внутреннего времени для взаимодействующих частиц, с точностью до выбранного зерна. Это означает, что внутри одного квантового мира для близких экземпляров время должно быть примерно одинаково, так как они должны взаимодействовать. Аналогично, для экземпляров близких квантовых миров (теперь близость надо трактовать как близость в конфигурационных пространствах с временами t_i^j), обменивающихся импульсами, различие времен должно тоже находиться в пределах зерна. Мы получаем следующую картинку для релятивистской сети КЭД, соответствующей одному состоянию $|\bar{\Psi}\rangle$. Здесь представление будет уже не двумерным, как в нерелятивистском случае, а трехмерным, поскольку в конфигурационное пространство теперь входит внутреннее время t, имеющее ту же детальную структуру, что и пространственная координата x.

Что теперь означает отбор квантовых состояний в ходе эволюции во внешнем времени τ? Он означает следующее. На каждом переходе от τ к $\tau + 1$ мы производим отбор состояний вида $|\bar{x}_i\rangle|\bar{t}_i\rangle$. Это отбор не обычных волновых функций, распределенных в пространстве. Это отбор динамических сценариев, то есть волновых функций, распределенных в пространстве-времени. Как может происходить такой отбор? Простейшая его форма есть группировка состояний по степени их близости в конфигурационном пространстве-времени и отбор групп с наибольшей плотностью. Это — простое обобщение уже сформулированного принципа отбора для нерелятивистского случая. При таком отборе фактически задействуются связи двух типов:

- связи, объединяющие взаимодействующие экземпляры разных частиц, то есть связи того типа, которые мы уже обсуждали;

- связи, объединяющие один и тот же экземпляр в разные моменты его индивидуального времени.

Второй тип связей означает наличие индивидуальных историй у каждого экземпляра. Как используются эти связи по внутреннему времени при моделировании? У них есть совершенно определенная роль. Она состоит в том, что мы отбираем не просто близкие состояния, а близкие динамические сценарии. Такие сценарии могут быть атрибутами конкретных экземпляров реальных частиц. Их перегруппировка в процессе отбора при генетическом программировании и означает рекомбинацию этих атрибутов. Оба эти типа связей расположены в плоскостях π_1 или π_2 на рис. 5.17.

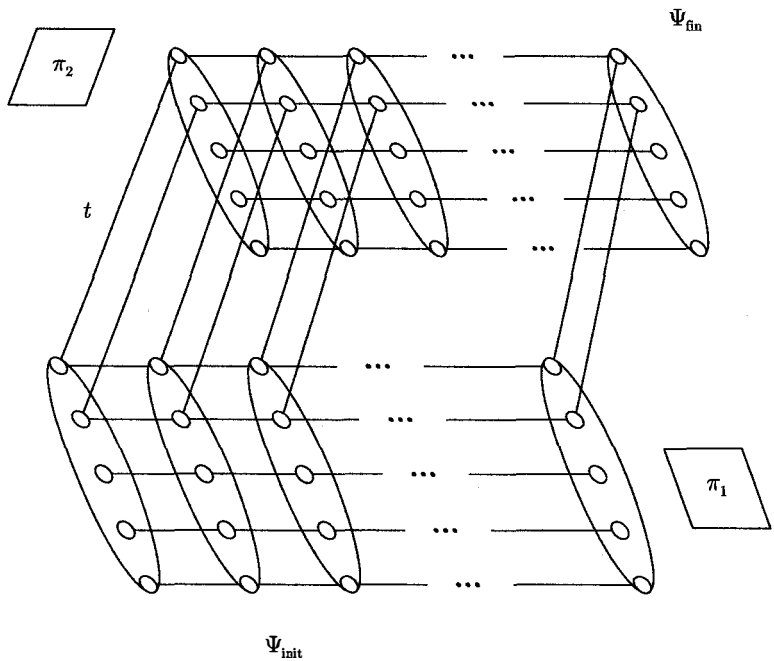


Рис. 5.17. Сеть, представляющая рассеяние

Возможны ли более сложные методы отбора, чем группировка сценариев по признаку их близости? Этот вопрос можно сформулировать немного иначе: можно ли ввести связи, соответствующие слагаемым в волновой функции, имеющим вид $|x_1\rangle|x_2\rangle|t_1\rangle|t_2\rangle$ для различных времен $t_1 \neq t_2$? Такие связи имели бы вид наклонных линий в нашей картинке, то есть не

были бы параллельны плоскостям π_1 или π_2. Введение таких связей может быть обусловлено только новыми методами отбора динамических сценариев, и потому этот вопрос остается без ответа.

Итак, конструктивное рассмотрение многочастичных квантовых систем в КЭД приводит нас к манипуляциям с динамическими сценариями, в каждом из которых имеется свое внутреннее время t. Эти манипуляции включают, например, отбор таких сценариев. Выживаемость определенных состояний в нерелятивистских моделях заменяется выживаемостью определенных сценариев. В таких сценариях может быть задействовано множество экземпляров реальных частиц, и они, в принципе, могут сохраняться длительное время в масштабе внешнего времени τ, приводя к наблюдаемым явлениям макроскопического характера, касающимся поведения сложных систем.

5.18. Проблема необратимости времени и связь с гравитацией

Поставив задачу масштабирования квантовой теории на системы многих частиц, мы неизбежно встречаемся с необходимостью ее стыковки с общей теорией относительности.[42] Основная видимая проблема такой стыковки заключается в том, что ОТО — теория одной частицы, в то время как квантовая теория принципиально многочастична. В ОТО частица движется по траекториям в пространстве-времени, которые являются геодезическими метрического тензора g_{ij}, который, в свою очередь, ищется как решение уравнения тяготения — довольно сложного нелинейного уравнения на g_{ij}. ОТО ничего не говорит о том, как g_{ij} связан со структурой гравитирующих тел; это умолчание заполняется при расчетах соображениями здравого смысла. Таким образом, формализм ОТО не является многочастичным. Имеющиеся попытки стыковки квантовой механики с ОТО сводятся либо к «дополнению» ОТО многочастичным аппаратом квантовой теории (аналогия с КЭД и попытки обнаружить гравитационные волны), либо к поиску «места» для гравитации в квантовомеханической картине мира.[43] Вряд ли можно ожидать, что такие попытки будут более успешными, чем прямая проверка квантовой теории в многочастичной области построением квантового компьютера.

[42]Или другими теориями, типа РТГ. Мы говорим про ОТО, потому что ее математические аспекты более всего разработаны, а для нас важен будет именно формализм для описания гравитации.

[43]Например, в качестве причины, вызывающей измерения (см. [38]).

Сохранение в неприкосновенности стандартного формализма квантовой теории ставит крест на надежде найти путь к гравитации. Но трудно поверить в то, что многочисленные аналогии между мирами квантовых и гравитационных явлений есть простая случайность. Одна из этих аналогий непосредственно касается нашего изложения — это обнаруженное в астрономических наблюдениях разбегание Вселенной, соответствующее фридмановскому решению уравнений ОТО. Скорость разбегания возрастает с расстоянием и экстраполяция в прошлое приводит к наиболее популярной сейчас гипотезе Большого Взрыва. Экстраполяция же на будущее ведет к гипотезе так называемого большого разрыва, согласно которой разбеганием будут постепенно охвачены все без исключения тела, включая элементарные частицы.

Фактически, в квантовой механике мы встречаемся с большим разрывом, когда рассматриваем унитарную эволюцию частицы, первоначально находившуюся в некоторой точке x_0. Это формализуется как начальное условие для задачи Коши в виде дельта-функции $\Psi(x,0) = \delta_{x_0}(x)$. Тогда в момент времени t волновая функция будет иметь вид фейнмановского ядра $K(x,t,x_0,0)$, то есть частица окажется «размазанной» по всей оси x. Это описывается в методе коллективного поведения как «взрыв пика». Такое поведение состояния вытекает из фундамента квантовой теории и в равной степени характерно и для случая многих частиц. Прибегнув к аналогии с гравитацией, где за «большой взрыв» ответственна темная энергия, и учитывая, что в рое расплывание определяется действием собственных связей (между разными экземплярами одной частицы, отвечающими за градиентное действие роя на тонкий слой), мы могли бы установить такое соответствие:

темная энергия $\leftarrow \quad \rightarrow$ *несобственные связи.*

Напомним, что мы не дали точной количественной характеристики «квантовой темной энергии», которая превращается в кинетическую энергию разлетающихся экземпляров роя. Причина этого ясна из предыдущего: «квантовая темная энергия» зависит от выбора зерна разрешения, в котором мы не вполне свободны, так как оно зависит от наличия других частиц, и собственных связей с рассматриваемой системой.[44] Определить «квантовую темную энергию» количественно, так как это делается оператором Гамильтона, таким образом, невозможно.

Можно ли «собрать заново» распавшееся таким образом состояние? Допустим, мы смогли каким-то образом обратить фазу волновой функции,

[44] Если мы измеряем расстояния с точностью до ϵ, нам необходимо наличие по крайней мере $O(1/\epsilon)$ других реальных частиц, иначе не будет иметь смысла само понятие расстояния, измеренного с этой точностью.

то есть получить состояние, похожее на ядро, с той лишь разницей, что под экспонентой стоит дробь с обратным знаком: $\exp(-imx^2/2ht)$. Тогда простое применение правила $\Psi(x_2,t_2) = \int K(x_2,t_2,x_1,t_1)\Psi(x_1,t_1)dx_1$ даст нам дельта-функцию через время t. Но как практически обратить фазу, неизвестно. Это и есть проблема обратимости времени в квантовой теории. Рассмотрим оператор энергии $H = \frac{p^2}{2m} + V$. Можно предположить, что обращение потенциала V — доступная задача. Но для обращения всего оператора H надо еще обратить знак у кинетической энергии $\frac{p^2}{2m}$, и тут никаких решений не видно. Время в квантовой механике оказывается необратимым!

Обратимся к абстрактной теории квантовых алгоритмов. Алгоритм Гровера (см. подробное описание в приложении) дает нам как раз искомую концентрацию амплитуды, прежде равномерно распределенной по всему конфигурационному пространству, на одном состоянии. Но продолжение итераций оператора Гровера G даст нам обратную эволюцию: распределение первоначально сконцентрированой амплитуды снова на все конфигурационное пространство. При дальнейших итерациях G состояния будут повторяться периодически. То есть последовательность итераций G даст эволюцию вида $\Psi \to \ldots \to \Psi_1 \to \ldots \to \Psi_2 \ldots\ldots$, так что переход $\Psi \to \Psi_1$ есть, фактически, переход из гильбертова пространства в конфигурационное, а $\Psi_1 \to \Psi_2$ — наоборот, и т. д. Ценность в квантовых алгоритмах представляет как раз первый из этих переходов, то есть аналог нужной нам концентрации амплитуды.[45]

Аналогия с алгоритмом Гровера показывает, что, в принципе, концентрация амплитуды получается с помощью ровно тех же средств, что и расплывание, но при очень важном условии: задача должна использовать много реальных частиц. Алгоритм Гровера — существенно многочастичный, и этим он отличается от свободной эволюции в стандартной квантовой теории. Почему реальная частица не прекращает существование после расплывания ее волновой функции? Потому что «расплывание» имеет смысл только при наличии многих частиц, составляющих то, что мы называем системой отсчета, которую в стандартном формализме вообще никогда не рассматривают вместе с частицей. Но именно в системе отсчета только и имеет смысл говорить о зерне dx пространственного и временного раз-

[45] Здесь можно было бы спросить, куда делась фаза из фейнмановского ядра, которая образуется при расплывании дельта-функции; дело в том, что все элементы конфигурационного пространства в теории квантовых алгоритмов отстоят на равные расстояния от $\bar{0}$, и потому их фазы одинаковы.

решения. Уменьшение dx, происходящее от введения в рассмотрение более длинных связей между экземплярами разных реальных частиц, и приводит к эффекту, который в стандартном формализме называется «измерением», а в конструктивизме это будет один из этапов селекции квантовых миров. Но алгоритм Гровера также показывает нам, что селекция может быть осуществлена теми же средствами, что и выполнение обычной шредингеровской эволюции. Этого мы не сделали, и это представляет важную задачу.

Сложность этой задачи в том, что алгоритм Гровера использует искусственную технику, а мы должны найти ей совершенно органичное описание, то есть описанные процессы перехода должны получаться у нас сами собой. Однако эта проблема представляется принципиально важной, потому что это вопрос в том, можно ли обратить вспять большой разрыв на квантовом уровне. Если в действительности существует объединение гравитации и квантовой механики в одной теории, то проблема обращения времени для большого разрыва, являясь главной космологической проблемой, должна иметь аналогичную формулировку в квантовой механике. Снова используя космологические термины, в которых «большому взрыву» препятствует «темная материя», мы можем предположить, что на квантовом уровне

темная материя ← → *собственные связи.*

Я не знаю, можно ли получить что-либо полезное из таких аналогий, но их применение может быть осмысленным в рамках ПКЕ (см. последнюю главу).

Глава 6

Квантовая нелокальность и элементарные события

Мы видели, что эвристика коллективного поведения дает нам явное выражение запутанности в виде сети кортежей — эверетговских миров, состоящих из экземпляров реальных частиц, объединенных связями. Именно понятие связи является главным элементом нашей эвристики, отличающей ее от стандартного гильбертова формализма многих частиц. Поэтому наличие экспериментальных подтверждений квантовой запутанности на больших расстояниях представляет аргумент в пользу эвристики коллективного поведения.

Рассмотренные ранее случаи запутанности имели в основном тип GHZ. Этот тип проще всего проиллюстрировать на примере молекулы водорода, состоящей из двух атомов 1 и 2, состояния которых мы будем записывать как $|\phi_1\rangle$ и $|\phi_2\rangle$ соответственно. Тогда, если мы возьмем зерно разрешения конфигурационного пространства $\Delta x \gg d$, где d есть расстояние между атомами в молекуле, то состояние молекулы запишется в виде GHZ-состояния:

$$|\Psi\rangle = \lambda_1|r_1\rangle|r_1\rangle + \lambda_2|r_2\rangle|r_2\rangle + \ldots + |r_n\rangle|r_n\rangle,$$

то есть будет запутанным. Например, для самого грубого разрешения, когда $n = 2$, мы имеем $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$. Если мы захотим померить импульс обоих атомов, то есть перейти к импульсному базису, надо совершить преобразование Фурье над состоянием каждого атома, в нашем вырожденном случае это будет просто преобразование Адамара с точностью до фазового сдвига. Если это проделать, нетрудно убедиться, что и в импульсном базисе наше состояние имеет тот же вид. Это означает именно наличие запутанности, так как в незапутанном случае мы бы всегда получили разброс состояний двух атомов. Запутанность GHZ-типа означает, что они ведут себя как одна частица. Например, молекула будет интерферировать, проходя через щели, так же, как если бы она была неделимым

объектом. Разумеется, это будет справедливо только до тех пор, пока нам не понадобится зерно разрешения, сравнимое с межатомным расстоянием; если это произойдет, например, внутренняя структура молекулы будет проявляться при внешних взаимодействиях, никакого GHZ-состояния уже не будет, и придется рассматривать атомы по отдельности (например, если при прохождении через одну из щелей молекула начинает вращаться). В рассмотренном примере вполне достаточно для изучения поведения молекулы применять стандартный формализм. Поэтому в тех примерах запутанности, которые мы до сих пор рассматривали, феномен связей был просто элементом формализма, удобным и даже необходимым для построения модели, но не более! Физик, занимающийся экспериментом, всегда мог сказать, что связь на очень малых расстояниях просто удобна для построения модели, и не более.

Но связь есть физический феномен, а не просто элемент формальной модели! Для установления этого нужно показать ее существование на больших расстояниях, так что в этом случае эффект от ее реального присутствия не мог бы быть сведен к точечным взаимодействиям.

Эти эксперименты были проведены впервые в 1980-х годах А. Аспеком и А. Цайлингером (см. ссылки в [20]). В этих экспериментах запутанность проявляется не на ангстремных расстояниях, как в молекуле водорода, а на расстояниях в несколько сотен километров. Здесь экспериментальные данные прямо свидетельствуют о необходимости принятия схемы конструктивной физики. В эксперименте получаются состояния вида $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$ для фотонов, которые детектируются на расстояниях нескольких сотен километров между ними. Представим себе, что первый фотон детектируется наблюдателем Алисой, а второй — Бобом. Условия эксперимента таковы, что у Алисы есть две возможности выбрать детектор, то есть измерительный базис в пространстве состояний ее кубита, и у Боба — тоже две возможности: Алиса может выбрать собственные вектора эрмитова оператора σ_x или σ_z, а Боб $-(\sigma_x + \sigma_z)/\sqrt{2}$ или $(\sigma_z - \sigma_x)/\sqrt{2}$ соответственно. Поскольку у всех перечисленных операторов собственные значения только 1 или -1, мы будем считать, что Алиса получила значение X или Y, а Боб — a или b соответственно, в вышеприведенном порядке. Например, можем условиться, что 1 означает, что детектируется фотон с горизонтальной поляризацией, а -1 — с вертикальной (относительно соответствующего положения детектора).

Определим случайную величину ξ как произведение результатов измерений Алисы и Боба, взятое со знаком минус, в том случае, когда выборы

детекторов были Y и b соответственно, и произведение результатов со знаком плюс во всех других случаях. Значение такой величины получается простым умножением и надлежащим изменением знака, после того, как Алиса и Боб выяснили, какую ориентацию детекторов избрал каждый из них; в ходе самого измерения они не согласовывают своего выбора.

При поверхностном взгляде может показаться, что X, Y, a, b есть случайные величины, с которыми можно оперировать, как с обычными числами. Временно примем такую точку зрения и проведем некоторый несложный подсчет математического ожидания ξ величины ξ. Во-первых, если мы вынесем X и Y за скобки в выражении

$$E = Xa + Xb + Ya - Yb,$$

то получится, что в одной скобке стоит 0, а в другой — число, по модулю равное 2. Тогда можно оценить E как $|E| = 2/4 = 1/2$, поскольку все четыре выбора ориентаций детектора равновероятны. Естественно, для случайных величин X, Y, a, b мы будем иметь точно такое же неравенство, причем безразлично, являются они зависимыми, или нет. Значит, и для математического ожидания $M(\xi)$ величины ξ мы получим неравенство $|M(\xi)| \leqslant 1/2$. А теперь подсчитаем $M(\xi)$ для выписанных нами наблюдаемых с помощью квантовомеханического правила $\langle A \rangle_\Psi = tr(\rho_\Psi A)$ определения среднего значения (собственных чисел) эрмитова оператора A в состоянии Ψ[1]. Несложный расчет[2] покажет, что $M(\xi) = \frac{1}{4} 2\sqrt{2}$ (множитель $1/4$ везде возникает из-за равновероятности выбора всех 4 комбинаций детекторов). Именно это и детектируется в эксперименте, к которому мы еще вернемся. В чем же дело? Где мы допустили ошибку в рассуждении? Очевидно, возможность ее совершить только одна: предположение о том, что результаты измерений Алисы и Боба выражаются как случайные величины X, Y, a, b использовалось нами нестрого, в силу того, что мы не применяли определения случайной величины. Сейчас мы восполним этот пробел и увидим, как это приведет нас к новому пониманию смысла эксперимента с двумя запутанными фотонами.

Рассмотрим эксперимент более строго. Для этого напомним основные понятия колмогоровской теории вероятностей. Она включает 3 объекта: вероятностное пространство, случайные величины и их численные характе-

[1]Оно вытекает из определения математического ожидания для собственных значений эрмитова оператора A: $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$.

[2]Надо рассмотреть все случаи ориентации детекторов и для каждого составить редуцированную матрицу плотности нашего состояния, а затем применить правило полной вероятности.

ристики. Сначала определим центральное понятие: множество элементарных исходов. Это (в конструктивизме конечное) множество

$$\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_k\},$$

каждый элемент которого отражает всю сущность мира, играющую роль для рассматриваемого эксперимента. Это означает, что, выбрав какой-либо элемент $\omega_j \in \Omega$, мы автоматически выбираем исход любого эксперимента из рассматриваемого набора, включая положение детектора, состояние всех элементарных частиц в нем, а также всех параметров, которые мы даже не знаем, но которые определяют, каков будет исход эксперимента (в методе коллективного поведения это будут точные координаты и скорости всех экземпляров, состояние и реакция всех связей, а также все параметры, определяющие генетический отбор сценариев).[3]

В силу негибкой формы «запрета на скрытые параметры» в копенгагенской квантовой механике, мы в ее рамках не имеем возможности рассмотреть даже приближение множества Ω. Таким образом, точное рассмотрение квантовомеханических задач для многих частиц обязано выходить за пределы копенгагенской квантовой теории. Выход за пределы подразумевает не нарушение законов, а рассмотрение сущностей, недоступных в копенгагенской теории. Можно выразиться иначе. Стандартные задачи квантовой теории, подразумевающие использование аппарата волновых функций и проекций, не должны использовать скрытые параметры, то есть не должны касаться вероятностной структуры волновой функции. К стандартным относятся задачи о поведении одной квантовой частицы или сводящиеся к ним. Однако рассматриваемая нами задача о запутанных фотонах не является стандартной, поскольку она касается уже двух частиц. Хотя запутанное состояние, рассматриваемое нами, в некотором смысле можно свести к одночастичному, но операторы наблюдения, используемые Алисой и Бобом, существенно различные, и потому мы имеем дело с существенно неодночастичным квантовым состоянием. Иногда для рассмотрения таких задач хватает арсенала копенгагенской теории, но рассматриваемый нами случай явно не относится к этой категории, и потому мы должны для нахождения решения использовать арсенал теории вероятностей, то есть явным образом выйти за пределы методов копенгагенской теории. Это не является пока каким-то ограничением последней. Ограничение наступит позже, и мы разберем это, а пока мы работаем с множеством элементарных исходов Ω.

[3]То обстоятельство, что мы не знаем структуры Ω, не играет никакой роли. Мы все равно должны рассматривать этот объект явно, если говорим о вероятностях. Мы говорим о применимости или неприменимости алгоритма к слову, несмотря на то, что сам факт применимости не распознается алгоритмически.

На множестве Ω надо определить σ — алгебру событий. Это множество S подмножеств Ω, замкнутое относительно всех алгебраических операций: сложение, вычитание, взятие пустого множества и самого Ω (конструктивизм работает только с конечными комбинациями, а потому не имеющий отношения к физике вопрос о бесконечных операциях не стоит).

На множестве S надо определить так называемую вероятность — функцию вида $P : S \to [0,1]$, удовлетворяющую аксиомам вероятности: $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$ для непересекающихся $A, B \in S$, $P(\emptyset) = 0$, $P(\Omega) = 1$.

Если кому-либо это определение кажется слишком тяжеловесным, можно предложить его упрощенный вариант, достаточный для наших целей. Под S можно понимать множество всех подмножеств Ω, под $P(A)$ — частное от деления числа всех элементов A на k. Последнее упрощение иногда называют частотным определением вероятности.

Далее, нам надо иметь арсенал так называемых случайных величин. Случайной величиной называется любая функция вида

$$\xi : \Omega \to R,$$

такая, что для любого отрезка $[x, y]$ выполняется включение $\{\omega \in \in \Omega \mid \xi(\omega) \in [x, y]\} \in S$.

Мы можем вычислять математическое ожидание случайной величины ξ по стандартной формуле $M(\xi) = \sum\limits_{x \in R} xP(\{\omega \in \Omega \mid \xi(\omega) = x\})$.

Надо сразу сказать, что бессмысленно искать «объяснения» эксперимента с бифотонами, не прибегая к приведенному выше строгому определению вероятности. Единственная математически точная формулировка понятия «вероятность» вытекает из приведенного определения. Теперь рассмотрим, как этот арсенал применяется к рассматриваемой ситуации.

С точки зрения квантовой механики, состояние $|\Psi\rangle$ двух рассматриваемых фотонов представляет единый вектор в гильбертовом пространстве состояний. Это означает, что существует такое пространство элементарных исходов Ω, что все величины X, Y, a, b являются случайными величинами над этим пространством, то есть функциями от элементарных исходов: $X(\omega), Y(\omega), a(\omega), b(\omega)$.

Теперь мы должны переформулировать условия эксперимента на языке теории вероятностей. У нас есть следующая ситуация. Алиса и Боб независимо друг от друга и совершенно случайным образом выбирают каждый какое-либо одно состояние детектора из имеющихся у него двух возможностей, сразу же после чего каждый фотодетектор детектирует попавший

в него фотон (конкретный результат измерения есть 1, если получено состояние $|\epsilon_1\rangle$ из базиса собственных векторов оператора наблюдаемой, и -1 — если $|\epsilon_2\rangle$; выбор из этих альтернатив осуществляется исходя из особенностей детектора). Это означает, что выбор ориентации детектора Алисой входит в некоторый объект ω_1, а выбор ориентации детектора Боба входит в объект ω_2, так что элементарный случайный исход одного эксперимента $\omega \in \Omega$ имеет вид (ω_1, ω_2). Если у фотонов есть какие-либо скрытые параметры, то параметры фотона, прилетевшего к Алисе, мы считаем входящими в ω_1, а для фотона, прилетевшего к Бобу, — в ω_2. Таким образом, мы должны предположить, что $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2$, где множества Ω_1 и Ω_2 соответствуют выборам Алисы и Боба соответственно. Такое предположение выражает так называемую свободу воли у обоих участников эксперимента. Отсутствие свободы воли означало бы попросту то, что выбор, скажем, Алисы, автоматически определял бы и выбор Боба. В реальных экспериментах вопрос с ориентацией решается не людьми, а электроникой, исходя из таких событий, которые, с точки зрения здравого смысла, обязаны быть независимыми (например, потоки посторонних фотонов из разных областей космического пространства). Свобода воли участников эксперимента является необходимым предположением, если мы занимаемся наукой.[4]

Теперь рассмотрим, что есть случайные величины X, Y, a, b. Поскольку ω_1 автоматически определяет ориентацию детектора Алисы, обозначим через Ω_1^X такое подмножество Ω_1, которое соответствует ориентации детектора X, и аналогично обозначим подмножества, соответствующие Y, a, b. При этом Ω_1 будет суммой непересекающихся подмножеств Ω_1^X и Ω_1^Y, а Ω_2 — суммой также не пересекающихся Ω_2^a и Ω_2^b. Мы должны принять, что результат детектирования Алисы есть случайная величина $\xi_1(\omega_1, \omega_2)$, а результат детектирования Боба есть случайная величина $\xi_2(\omega_1, \omega_2)$, так что общий результат есть декартово произведение $\xi = (\xi_1, \xi_2)$, причем X есть ограничение функции $\xi(\omega_1, \omega_2)$ на область $\omega_1 \in \Omega_1^X$, Y есть ограничение функции $\xi(\omega_1, \omega_2)$ на область $\omega_1 \in \Omega_1^Y$, a есть ограничение функции ξ на область $\omega_2 \in \Omega_2^a$ и b — на область $\omega_2 \in \Omega_2^b$. Для того чтобы сделать величины X, Y, a, b определенными на всем множестве элементарных исходов Ω, мы дополним их нулем в тех областях, где они не определены нами явно.

[4]Научность означает, что предмет изучения должен быть отделен от субъекта, так как иначе мы получим просто логическое противоречие. Если предметом является эксперимент с фотонами, надо считать, что детекторы оказываются связанными фотонной нитью. Если предмет изучения — Алиса или Боб, то надо рассматривать связи между ними или между ними и еще кем-то. Эта ситуация уже встречалась нам — при доказательстве конструктивной версии отсутствия скрытых параметров. Здесь нет никакой необъективности: речь идет о конструктивном математическом аппарате и фотонных нитях как о его части.

Определим случайную величину ξ так:

$$\xi(\omega_1,\omega_2)=\begin{cases}\xi_1(\omega_1,\omega_2)\xi_2(\omega_1,\omega_2), & \text{если } \omega_1\notin\Omega_1^Y \text{ или } \omega_2\notin\Omega_2^b,\\ -\xi_1(\omega_1,\omega_2)\xi_2(\omega_1,\omega_2), & \text{если } \omega_1\in\Omega_1^Y \text{ и } \omega_2\in\Omega_2^b.\end{cases}$$

Тогда мы имеем: $\xi = Xa + Xb + Ya - Yb$.

Посчитаем ее матожидание по приведенному определению, выбрав частотное определение вероятности. У нас получится

$$M(\xi)=\frac{1}{k}\sum_{\omega_1,\omega_2} X(\omega_1,\omega_2)a(\omega_1,\omega_2)+X(\omega_1,\omega_2)b(\omega_1,\omega_2)+ \\ +Y(\omega_1,\omega_2)a(\omega_1,\omega_2)-Y(\omega_1,\omega_2)b(\omega_1,\omega_2).$$

Отметим, что мы здесь пользуемся тем, что многие называют реализмом. Это означает, что мы имеем право неоднократно пользоваться ограниченным количеством букв ω_j, так что любые их комбинации будут соответствовать реальным экспериментам по детектированию фотонов. По-иному это можно сформулировать как свободу воли при выборе из конечного набора вариантов реальности. Нетрудно убедиться, что с данным выражением для матожидания невозможно поступить так, как это было выше проделано с числами при доказательстве неравенства Белла, в силу наличия аргументов у случайных величин.

Однако предположим, что, помимо очевидного для нас реализма, у нас имеется еще и так называемая локальность. Кратко говоря, локальность означает, что результат измерения Алисы никак не зависит от ориентации детектора Боба, и наоборот. Мы обсудим физический смысл локальности ниже. Формально локальность означает, что X и Y зависят только от ω_1, а a и b — только от ω_2. Тогда мы сможем проделать с выражением для матожидания тот же самый трюк, что и при доказательстве неравенства Белла, а именно: мы сгруппируем все слагаемые большой суммы в группы по 4 вида

$$X(\omega_1)a(\omega_2')+X(\omega_1)b(\omega_2)+Y(\omega_1')a(\omega_2')-Y(\omega_1')b(\omega_2),$$

состоящие из ненулевых членов, так что внутри каждой группы можно будет вынести X и Y за скобки, и так же, как и выше, доказать, что эта группа не превышает 2. Поскольку в группе задействуется 4 различных ω, мы получаем, что математическое ожидание ξ не превосходит $1/2$, то есть локальность ведет к выполнению неравенства Белла. Таким образом, мы

пришли к выводу, что из эксперимента по детектированию бифотонов вытекает нелокальность квантовой механики.

Теперь рассмотрим нелокальность подробнее. Она означает, что случайные величины, относящиеся к Бобу, зависят не только от его компоненты элементарного исхода, но и от компоненты, принадлежащей Алисе, и наоборот, то есть все исходы X, Y, a, b зависят как от ω_1, так и от ω_2.

Как это может быть реализовано? Только так: есть некоторый объект $\tilde{\omega}$, который путешествует от Алисы к Бобу и обратно, перенося информацию о другой половинке элементарного исхода соответствующего эксперимента. Если этот объект $\tilde{\omega}$ подчиняется ограничению релятивизма, и не может передвигаться быстрее света, то мы можем вывести ограничения на времена испускания бифотона источником и времен детектирования прибытия каждого из фотонов Алисой и Бобом. Пусть Δt — естественная неопределенность момента испускания бифотона источником, о которой мы предполагаем, что все бифотоны, время испускания которых лежит вне этого диапазона, не играют никакой роли для получения статистики в данном эксперименте. Наличие такого интервала есть непосредственное следствие соотношения неопределенности «энергия–время». Теперь мы предположим, что часы Алисы, Боба и источника бифотона точно синхронизированы, и введем величину δt, равную разности момента срабатывания детектора и момента выбора его положения (то есть выбора между X и Y и между a и b). Тогда если материальный объект $\tilde{\omega}$, переносящий информацию о другой половинке элементарного исхода, подчиняется релятивизму, то должно выполняться неравенство

$$\Delta t + \delta t \geqslant d/c, \tag{6.1}$$

где d есть расстояние между Алисой (или Бобом) и источником бофотонов, c скорость света.

Эксперименты свидетельствуют, что это неравенство нарушается для бифотонов, детектируемых на расстояниях в несколько сот километров, что имеет совершенно фундаментальные следствия для квантовой теории. Действительно, нарушение (6.1) говорит о том, что $\tilde{\omega}$ не может быть скрытым параметром ни одного из фотонов.[5] То есть $\tilde{\omega}$ непосредственно переносит информацию об ориентации детекторов от Алисы в Бобу или наоборот. Этот эффект принято называть «квантовой нелокальностью»; он формально вытекает из стандартного квантового формализма, но в действительности

[5] В реальных экспериментах, как правило, проверяют не нарушение (6.1), а непосредственно предотвращают обратное перенесение информации самими фотонами, выставляя заглушки после их прохождения.

данный экспериментальный результат делает необходимым как раз переход от этого формализма к конструктивному.[6]

Квантовая теория полностью согласуется с принципом релятивизма, согласно которому никакая информация не может перемещаться со скоростью, превосходящей скорость света. Формально это выражается в том, что статистика измерений Алисы никак не зависит от того, измеряет Боб свой кубит или нет. То есть с помощью запутанного квантового состояния невозможно передавать информацию, генерированную участниками эксперимента друг другу. Но мы только что выяснили, что это ограничение не распространяется на информацию об элементарных исходах в эксперименте о измерении квантовых состояний!

Из этого можно сделать только один вывод. Имеется административная система, взаимодействие с которой и определяет реальность. Это взаимодействие в точности соответствует взаимодействию пользователя с компьютером. Пользователь, то есть экспериментатор, определяет условия (положение детекторов), после чего административная система, работающая с элементарными исходами, выдает результат эксперимента. При этом время, потраченное административной системой на согласование заданных различными пользователями условий, не является реальным физическим временем. (Так нельзя утверждать относительно общего времени, которое административная система тратит на обработку пользовательстких условий; более того, конструктивизм как раз и предполагает, что административная система строго подчиняется принципу Маркова, то есть действует как компьютер.) Поэтому на действия с элементарными исходами не распространяется ограничение релятивизма, которое справедливо только для пользователей. Это и есть в точности схема физического конструктивизма.

Заметим также, что к операциям над элементарными исходами нельзя применять и квантовую механику как таковую, поскольку она, как мы это уже видели, полностью согласуется с принципом релятивизма. Таким образом, только одно лишь разделение пользовательской и административной частей модели, имеющееся в конструктивизме, адекватно описывает возникающую ситуацию, что является еще одним аргументом в пользу физического конструктивизма.

Передача информации от ω_1 к ω_2 происходит вдоль связей, соединяющих пары экземпляров фотонов, детектируемых в данном эксперименте. Такая передача происходит в административной части, и ее нельзя использовать для передачи пользовательской информации, то есть значения битов, которые задуманы Алисой или Бобом. Иными словами, с точки зре-

[6]Развернутый обзор различных точек зрения на квантовую нелокальность в ее стандартном понимании можно найти в книге [71].

ния экспериментатора, то есть пользователя, передача $\omega_1 \to \omega_2$ происходит мгновенно, но это никоим образом не нарушает релятивистское ограничение, которое относится исключительно к пользователям.[7]

Выражение, стоящее в левой части неравенства Белла, в действительности является очень общим. Фактически, алгебраические выражения вида

$$F = \sum_j A_j B_j$$

лежат в основе всей квантовой теории, поскольку так представляются волновые функции; при этом произведение $A_j B_j$ всегда возникает там, где есть какое-то взаимодействие. Что означают эти выражения? Каждое слагаемое, соответствующее определенному j, представляет собой отдельный квантовый мир, внутри которого только и может идти взаимодействие. Если для каких-либо $j_1 \neq j_2$ выполнено равенство

$$A_{j_1} = A_{j_2}, \tag{6.2}$$

то мы можем вынести в сумме F за скобку A_{j_1}, получив выражение вида $\ldots A_{j_1}(B_{j_1} + B_{j_2})\ldots$, так что в скобке останется эффект от интерференции между элементами квантовых миров. На таком приеме стоит принцип суперпозиции, являющийся ядром квантовой теории. Что же нам дает нарушение неравенства Белла? Мы видели, что это нарушение фактически означает нарушение равенства (6.2). Если входящие в выражение для волновой функции величины A и B являются реальными, а не абстрактными, то есть зависят от некоторых элементарных исходов, то такая зависимость, будучи, вообще говоря, нелокальной, немедленно влечет нарушение равенства (6.2), а вслед за ним делает невозможным и применение принципа суперпозиции, лежащего в основании квантовой теории! Иными словами, если мы будем пытаться масштабировать квантовую теорию, например, квантуя объекты, определяющие систему координат, и т. д., мы сразу же придем к противоречию с экспериментами, указывающими на фундаментальную нелокальность квантовых объектов.

Потенциальное нарушение равенства (6.2) в точности соответствует рассмотрению квантовой эволюции в терминах конструктивного математи-

[7]Мы уже встречались с мгновенной передачей взаимодействия на расстояние: именно так «передается» действие кулоновского скалярного поля (см. параграф «Квантовая электродинамика»), осуществляемого скалярными фотонами. Разумеется, «сигналить» ими невозможно, так как у них нулевой импульс. Именно эти связи между экземплярами фотонов являются носителями как векторных фотонов (являющихся их «колебаниями» и распространяющихся со световой скоростью), так и административной информации о состояниях детекторов.

ческого анализа (см. главу 2). Природа A_{j_1} и A_{j_2} различна, так как различны их аргументы — элементарные исходы. Мы не знаем этих аргументов для объектов реального мира; можем явно выписывать их только для нашей компьютерной модели. Значит, если трактовать эти числа как конструктивные, они задаются некоторыми алгоритмами, генерирующими их последовательные приближения. На каждом шаге моделирования у нас есть лишь эти приближения, которыми мы и должны манипулировать, строя модель. При этом точные их значения доступными нам быть не могут, в силу невозможности распознавания равенства конструктивных чисел.

Вывод состоит в том, что квантовая теория для систем, состоящих из более чем одной частицы, должна пользоваться математическим аппаратом конструктивизма, при котором пространство элементарных исходов рассматривается явным образом, например, так, как в эвристике коллективного поведения; при этом пользовательский доступ к нему определяется с помощью алгоритма, каждый шаг которого соответствует тому знанию, которое доступно экспериментатору в данный момент. В этом случае элементарные исходы соответствуют экземплярам фотонов, которые оказываются связанными связями, то есть объектами, которые принадлежат административной системе.[8]

6.1. Конструктивный взгляд на квантовый компьютер

Метод коллективного поведения дает принципиальный путь преодоления проблемы квантового компьютера, то есть экспоненциального роста классических вычислительных ресурсов, необходимых для точного воспроизводства унитарной динамики в полном гильбертовом пространстве состояний. Этот путь состоит в том, что декогерентность есть фундаментальный фактор, учет которого в виде ограниченности классической памяти дает нам (пока гипотетическую) возможность строить модели биохимии на классических компьютерах.

Однако и в случае применения эвристики коллективного поведения мы встретимся с одной трудностью. Она состоит в необходимости переносить информацию вдоль связи, объединяющей экземпляры одного квантового мира. Чистым математикам эта трудность может показаться пустяком, но в действительности это — серьезная трудность. Научная логика объединяет экземпляры не в отдельные миры, а в рои, соответствующие реальным

[8] Явное рассмотрение исходов понимается нами именно в конструктивном смысле, то есть как знание алгоритмов, генерирующих конструктивные числа, например, исходы эксперимента по определению координат частицы при данных условиях.

частицам. При практическом построении моделей неизбежной будет ситуация, когда разные группы программистов будут работать над разными группами реальных частиц. Если мы сгруппируем реальные частицы в несколько непересекающихся ансамблей $\Gamma_1, \Gamma_2, \ldots, \Gamma_k$, то эволюция каждого из таких ансамблей Γ_j будет, в основном, представляться на своем процессоре P_j. Тогда связи, объединяющие экземпляры внутри любого квантового мира, будут связями между данными процессорами P_j.

Какого рода информация может передаваться вдоль таких связей? Мы уже видели, что это может быть просто действие кулоновского поля. Это также может быть простая синхронизация, носящая характер классической корреляции. Такая корреляция является, фактически, задачей распространения открытого ключа в криптографии. Представим себе, что различные процессоры (скажем, P_1 и P_2) должны иметь возможность сгенерировать общий только для них одних код, который будет использоваться в дальнейших вычислениях на этих процессорах. Такая проблема возникает при моделировании специфических для живого организма белков — гамма-глобулинов, позволяющих антителам идентифицировать собственные ткани, отличая их от чужеродных. Для решения задачи распространения ключа можно, разумеется, использовать методы одночастичной криптографии, в том числе и квантовой. Однако если такая синхронизация встроена в сложный процесс локальных вычислений на обоих процессорах, предпочтительнее будет выбор для нее именно двухфотонного механизма. При двухфотонном механизме синхронизация не будет занимать никакого времени, то есть не будет сдерживать вычислений. Время ожидания прохождения сигнала от P_1 к P_2 может составлять сотни микросекунд, если эти процессоры находятся в различных городах, и это способно существенно затормозить работу вычислительной сети, занятой моделированием. Этот аргумент относится исключительно к организации вычислений, а не к самим моделируемым процессам; я не утверждаю, что в реальных системах синхронизация осуществляется именно таким механизмом.

Рассмотрим классический процесс синхронизации при проникновении молекул через клеточную мембрану (см. рис. 6.1). Это проникновение происходит через специальные поры, которые могут находиться в открытом или закрытом состоянии. Проникающие молекулы транспортируют важные для клетки вещества, и в то же время мембрана должна быть непроницаемой для других, вредных веществ. Поэтому пора должна открываться именно в тот момент, когда такой транспорт готов к проникновению. Сама по себе пора является сложным механизмом, так же как и молекула транспортного белка, так что совершенно нецелесообразно загружать один процессор моделированием внутренней эволюции той и другой системы. Моделирова-

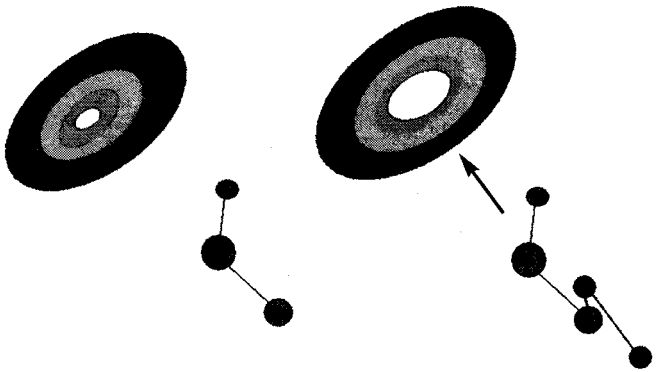


Рис. 6.1. Проникновение транспортной молекулы через пору в клеточной мембране

ние всего процесса в целом требует поэтому синхронизации эволюций для получения нужного эффекта.

Здесь я говорил о мгновенной классической корреляции различных процессоров с использованием фотонных пар. Но использование для установления такой корреляции запутанных пар фотонов обещает еще большие преимущества. Действительно, рассмотрим процесс образования вторичной и третичной структуры белковой молекулы, основанного на образовании водородных связей между различными аминокислотами. Если моделирование разных частей такой молекулы происходит в разных процессорах, то при появлении связи на базе туннелирования протона нам будет нужно иметь настоящую квантовую модель этой связи в обоих частях вычислительного комплекса.

Разумеется, любую квантовую корреляцию можно моделировать классическими средствами, если допустить возможность прохождения сигнала от одного процессора к другому. Недостаток такой идеологии состоит в том, что она противоречит базисным требованиям архитектуры вычислительной системы. Эти требования состоят в том, что вычисления должны происходить под управлением центрального процессора — ЦП (см. рис. 6.2).

ЦП посылает сигналы к разным локальным процессорам, каждый из которых занят моделированием определенной подсистемы в целой системе. Например, ЦП определяет, что надо синтезировать некоторый полимер A специфической активности в некоторой подсистеме и одновременно другой полимер B, подавляющий (или усиливающий) эту активность, — в другой подсистеме. ЦП посылает пакет сигналов к обеим подсистемам, после чего быстро переключается на другую задачу (например, одновременный

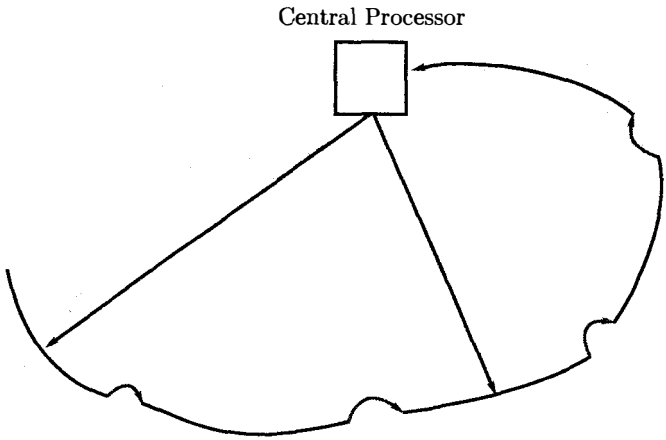


Рис. 6.2. Структура модели сложной системы

синтез другой пары A' и B'). Что получится, если сами подсистемы будут посылать друг другу сигналы? Предположим, что у нас есть m разных подсистем, каждая из которых управляется своим локальным процессором. Для правильной адресации взаимных сигналов между локальными процессорами (будет порядка m^2 способов выбора) надо будет загрузить ЦП задачей адресации этих сигналов. Тогда ЦП будет вынужден ждать время cD, где D — расстояние между локальными процессорами, c — скорость света, прежде чем переключиться на новую задачу. Если таких задач очень много (а в реальной модели биохимического метаболизма их должно быть очень много) такая задержка приведет к фатальному замедлению модели. Поэтому идея прямого обмена сигналами между разными локальными процессорами является неудачной. Мы, таким образом, приходим к необходимости организации вычислений с помощью одностороннего управления со стороны ЦП, который осуществляет его, рассылая пакеты сигналов к различным парам процессоров. ЦП также может и получать сигналы от локальных подсистем, но не напрямую, а по цепочке связанных друг с другом процессоров. Такая организация модели живой системы является самой удачной, так как при этом мы максимально разгружаем ЦП от рутинных задач по поддержанию метаболизма (обмена веществ).

Итак, архитектура вычислительного комплекса должна иметь вид, изображенный на рисунке, и общее управление моделью осуществляется ЦП. При этом ЦП сообщается с основной массой локальных процес-

соров с помощью односторонней связи, а обратная связь проходит только через один или малую группу локальных процессоров, так что сигнал от удаленной подсистемы доходит до ЦП только по цепочке промежуточных подсистем.

В эвристике коллективного поведения запутанность квантового состояния отображается через особый объект — связи между экземплярами разных реальных частиц. Мы предполагаем, что именно манипуляция связями поможет нам создать модели сложных систем, так как это единственный способ работы с запутанными состояниями. Связи между экземплярами частиц, принадлежащих одной подсистеме, будут обрабатываться одним локальным процессором. Однако связи между экземплярами частиц, принадлежащих к разным подсистемам, требуют особого внимания. Такие связи мы будем называть дальними. Я еще раз подчеркну, что речь здесь идет не о реальном физическом удалении одной подсистемы от другой, а об удаленности локальных процессоров, обрабатывающих эти подсистемы. У нас есть все основания считать, что дальние связи очень важны для получения правильных сценариев динамики сложных систем. Тогда мы должны доверить работу с дальними связями центральному процессору. Он может при этом действовать чисто классическим образом, рассылая сигналы выбранным локальным процессорам.

Но существуют ситуации, в которых использование ЦП бифотонов дает преимущество по сравнению с классическими сигналами.

Рассмотрим такую абстрактную задачу. Пусть нам нужно синтезировать две молекулы полимера вида

$$A_1, A_2, \ldots, A_m,$$
$$B_1, B_2, \ldots, B_m,$$

состоящих из моноблоков двух видов: a или b (см. рис. 6.3). Моноблоки скрепляются промежуточными линейными участками, которые могут растягиваться или сжиматься. При этом каждый моноблок может быть сдвинут по линии цепочки на некоторое dx либо вправо, либо влево. Синтез происходит путем последовательного присоединения к имеющейся цепочке нового моноблока, который первым подошел к точке сборки (запас моноблоков находится в хаотическом движении). При этом есть возможность сдвинуть присоединяемый моноблок либо вперед, либо назад вдоль цепочки на малое расстояние dx. Будем обозначать сдвиг вперед через $+$, назад через $-$. Таким образом, любой участок A_j или B_j есть пара вида c, s, где $c \in \{a, b\}$, $s \in \{+, -\}$. Предположим, что сборка полимера A происходит в одной точке, а полимера B — в другой, так что их модели удалены друг от друга на значительное расстояние (например, они моделируются в разных странах).

Теперь предположим, что мы взяли два моноблока A_j и B_j и наложили их друг на друга, с учетом произведенного сдвига. Представим себе, что у каждого моноблока есть выдвинутый центр, а также две поверхности, так что эта пара моноблоков может склеиваться друг с другом либо при совмещении центров, либо при совмещении их поверхностей, покрытых специальным клеем (см. рисунок). Назовем наложение нормальным, если моноблоки склеиваются либо центрами, либо поверхностями. В противном случае наложение будет считаться критическим. Например, критическим будет наложение моноблока b в цепочке A на моноблок a в цепочке B, при котором они оказались сдвинутыми в одну сторону (оба вперед или оба назад). При всех других выборах моноблоков критическим будет, наоборот, случай сдвигов в разные стороны.

Задача состоит в том, чтобы организовать их синтез так, что критических наложений при совмещении двух цепочек A и B было бы как можно меньше.

Такая задача могла бы возникнуть при моделировании одновременного синтеза гена и антигена в разных клетках. Разумеется, мы могли бы организовать моделирование с помощью обмена информацией между двумя пунктами сборки на каждом ее шаге. Однако при удаленности процессоров, занятых моделированием, такой подход существенно увеличил бы время моделирования, так как приходилось бы ждать прохождения светового сигнала между компьютерами на каждом шаге процесса, что свело бы на нет использование быстрых машин. Можно осуществлять синхронизацию с помощью классически скореллированных фотонных пар. Однако использование бифотонов в данной задаче даст явное преимущество перед классическими схемами корреляции.

Поскольку для минимизации числа критических наложений мы собираемся применить состояния ЭПР-типа $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$, необходимо обосновать то, что это даст выигрыш по сравнению с классически скореллированными фотонными парами. Для этого мы применим неравенство Белла в форме $M(|a_1b_2 + b_1b_2 + a_1a_2 - b_1a_2|) \leqslant 1/2$, где используются следующие соглашения.

Пусть нижний индекс обозначает номер точки сборки: 1 или 2. Буква a или b обозначает тип моноблока, а значение соответствующей величины равно $+1$, если производится сдвиг данного моноблока вперед, и -1, если он сдвигается назад при монтаже. Таким образом, результат сборки в обеих точках будет полностью задан, если для каждого из нижних индексов 1 и 2 будет, во-первых, определена буква a или b, и, во-вторых, — знак сдвига $+$ или $-$. Буква a или b всегда определяется типом того моно-

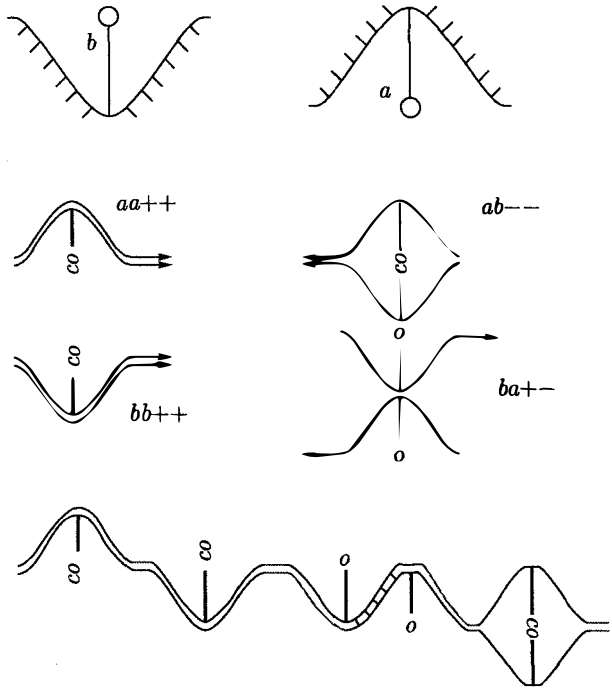


Рис. 6.3. Наложение двух полимеров: красным цветом показана линейная связь, зоны склейки показаны короткими штрихами

блока, который случайно оказался в данный момент ближайшим к данной точке сборки. Таким образом, у нас есть возможность управлять сборкой только с помощью выбора знаков сдвига $+$ или $-$ в обеих точках сборки. Поскольку мы хотим, чтобы процесс моделирования сборки не тормозился из-за коммуникаций между двумя точками, нам надо принимать одновременно решение о выборе знаков в обеих точках. Тогда в случае классической корреляции синхронизирующих фотонов у нас будет выполняться неравенсто Белла. Введем показатель критичности одного шага сборки как $Cr = +1$, если он дает некритическое наложение, и $Cr = -1$, если критическое. Нас будет интересовать число некритических наложений $NonCr$. Задача состоит в том, чтобы сделать его максимальным. Для одной пары моноблоков мы имеем $NonCr = \frac{1}{2}(1 + Cr)$. В силу того, что каждая комбинация aa, ab, ba, bb встречается с вероятностью $1/4$, для математического

ожидания $M(Cr)$ показателя критичности мы имеем

$$M(Cr) = \frac{1}{4}(a_1b_2 + b_1b_2 + a_1a_2 - b_1a_2), \tag{6.3}$$

что, в силу неравенства Белла, даст нам для математического ожидания числа некритических наложений неравенство $M(NonCr) \leqslant \frac{1}{2}\left(1 + \frac{2}{4}\right) = \frac{3}{4} = 0.75$.

Но в случае квантового ЭПР-состояния этих фотонов ситуация будет иной. Здесь у нас нет возможности пользоваться единым вероятностным пространством для двух точек сборки, и потому неравенство Белла не будет иметь места. Итак, пусть в каждой точке сборки стоит свой фотодетектор, который может иметь ориентацию, соответствующую таким наблюдаемым. Для первой и второй точки это будут

$$\begin{aligned} a_1 &= \sigma_x, & b_1 &= \sigma_z, \\ a_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_z - \sigma_x), & b_2 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + \sigma_z) \end{aligned} \tag{6.4}$$

соответственно. Условимся, что тип очередного мономера для сборки определяет соответствующее ему положение детектора в каждой точке, а знак сдвига моноблока равен значению соответствующей наблюдаемой. Снова, поскольку все сочетания типов мономеров aa, ab, ba, bb равновероятны, мы можем пользоваться формулой (6.3) для вычисления математического ожидания индекса критичности. Но теперь математическое ожидание значения данной суммы будет равно $2\sqrt{2}$ (это легко подсчитать непосредственно), и для математического ожидания числа некритических наложений у нас получится значение $M(NonCr) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{2\sqrt{2}}{4}\right) \approx 0.85$. Таким образом, использование ЭПР-пары фотонов для координации процесса сборки дает ощутимое преимущество для данной задачи.

Отмеченный нами эффект может показаться малым, но в действительности он существенен. В конкурентной среде с механизмом отбора даже малое преимущество быстро превращается в решающее. К тому же приведенная выше ситуация, несмотря на ее абстрактный характер, по-видимому, довольно типична и может повторяться в различных неравновесных процессах в живой клетке.

Как мы видим, применение бифотонного управления в различных ситуациях может повысить вероятностные характеристики эффективности по сравнению с классическим управлением. Поскольку эволюция клетки есть

последовательность большого числа элементарных шагов, то вероятностные характеристики эффективности должны перемножаться по всем элементарным шагам, и результирующая эффективность применения бифотонного управления существенно превзойдет классический аналог.

Применение бифотонов для установления связи между разными процессорами представляется самым верным путем развития технологий суперкомпьютеров. Мы можем сказать, что такой гибрид кремниевого классического компьютера с источниками бифотонов является самый реалистическим воплощением идеи квантового компьютера в настоящее время. Развитие этого пути может включать и более сложные многофотонные состояния, например, запутанные состояния четырех или шести фотонов, что поможет более реалистично представлять реальные связи между процессами, моделирующимися на разных частях вычислительного комплекса. Возможно и применение запутанных состояний частиц с ненулевой массой, например, сверхпроводящих куперовских пар, возбужденных состояний ионов в ловушках или электронов в квантовых точках. Программное обеспечение, созданное на основе метода коллективного поведения, должно позволять с легкостью включать в модель запутанные состояния любого типа.

С практической же точки зрения, использование запутанных многофотонных состояний является самым правильным путем использования удивительного квантового феномена нелокальности. Можно предположить, что в ближайшей перспективе именно такое понимание квантового компьютера обещает нам наибольший успех. И главной сферой применения таких компьютеров является задача моделирования сложных систем в биохимии. Дальнейшее продвижение идей физического конструктивизма и его распространение на иные типы сложных систем неразрывно связано с развитием соответствующих программных средств, и этому должны быть посвящены специальные усилия.

Важной составной частью физического конструктивизма является представление о декогерентности как о фундаментальном факторе, который представляется как ограниченность классической памяти моделирующего компьютера. Из этого положения следует, что мы должны высоко ценить те эффекты квантовой запутанности, которые выявляются в экспериментах. Поэтому конструктивный подход к квантовому компьютеру несколько отличается от традиционного. Квантовая часть такого компьютера должна включаться в классическую в качестве одного из управляющих элементов, то есть как разновидность оракула. Конструктивная схема квантового компьютера схематично изображена на рисунке 6.4. Эта схема предусматривает явно традиционный путь распараллеливания «по конфигурационному пространству» (разные участки реальной системы обслуживаются разными процессорами).

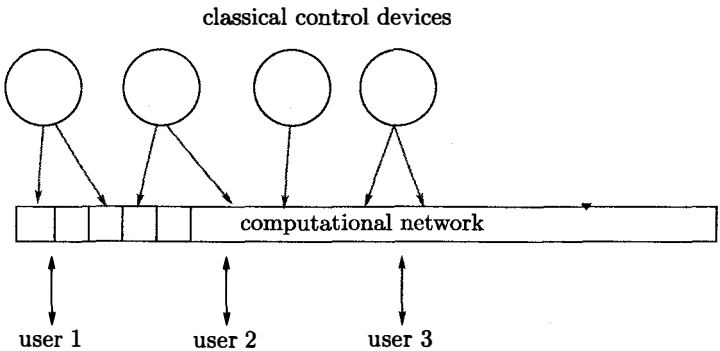


Рис. 6.4. Конструктивная схема квантового компьютера

Однако метод коллективного поведения предлагает нам и другой вид распараллеливания — по квантовым мирам. При этом разные группы квантовых миров обслуживаются разными процессорами. Здесь один процессор содержит в себе целостную модель всей системы, а взаимодействие между процессорами соответствует взаимодействию между квантовыми мирами.

В стандартной квантовой теории эвристика является промежуточным звеном и предназначена для получения уравнений, решение которых и является главной задачей. В конструктивизме все обстоит иначе. Здесь уравнения являются вспомогательным этапом для получения эвристики, которая используется при моделировании явлений. При исследовании стандартных задач (сводящихся к одночастичным) конструктивный подход даст только замедление расчетов. Он должен применяться только для сложных систем. В чем эффект конструктивизма для сложных систем? Он дает возможность прямо оперировать с запутанностью как с физическим явлением, представляя его в виде связей. Ничего подобного нет в стандартном гильбертовом формализме. Наличие формального объекта-связи открывает нам совершенно новые возможности. С таким формальным аппаратом можно надеяться получить описание многоатомной химии, то есть реально продвинуться по пути изучения сложных систем.

Мне могут возразить, что это уже не будет физикой. Я хотел бы уклониться от спора о терминах. На самом деле важна суть: если мы хотим изучать сложные системы, мы должны перейти в физике к конструктивизму. Только тогда мы можем рассчитывать на реальное продвижение. Разделение наук связано с наличием совершенно особых явлений в каждой из них, и под продвижением мы понимаем распространение на эти явления точных методов, то есть экспансию физики. Надо ясно понимать, что такая экс-

пансия не может быть бесплатной, и конструктивизм является минимально возможной ценой.

6.2. Черный ход в квантовой информатике

Задачи применения квантовой теории к многочастичным системам составляют главную задачу квантовой информатики. В рамках стандартного подхода к квантовой теории основным содержанием этой дисциплины является построение и анализ квантовых компьютеров, а также квантовая криптография. Конструктивизм привносит возможность некоторых новых поворотов в традиционные задачи этой дисциплины, которые мы здесь обсудим. Эти новые варианты постановок задач вытекают не из конструктивизма как такового, а, скорее, из его духа. Конструктивизация физики осуществляется совсем не ради решения проблем перебора, ее цель — моделирование многочастичных систем. Тем не менее, успех конструктивизма не может не сказаться на тех традиционных задачах квантовой информатики, для которых уже найдены более эффективные, по сравнению с классическими, решения. Речь пойдет о быстрых квантовых алгоритмах и о квантовой криптографии.

Конструктивизм вводит новые ограничения на вычислительные возможности квантовых систем, фактически подчиняя их некоему классическому суперкомпьютеру. Но мы также получаем некий новый объект — связи между экземплярами частиц.[9] Этот новый объект не принадлежит стандартному формализму, равно как и сами экземпляры. Но присутствие таких объектов в конструктивном формализме дает нам основания говорить об их объективности, и это обстоятельство может открыть новые возможности в решении традиционных задач квантовой информатики: быстрые квантовые вычисления и защищенные квантовые каналы связи. Мы попытаемся обсудить эти возможности в очень общей форме, признавая, что представление об их наличии есть всего лишь спекуляция, целиком основанная только на методе коллективного поведения, который выбран нами в качестве основы квантовой эвристики.

Этот новый взгляд на задачи квантовой информатики вернее было бы назвать «черным ходом», так как он предусматривает не решение этих задач в их первоначальных формулировках, а обход самих формулировок. Общепринятые формулировки задач квантовой информатики полностью основываются на стандартном понимании квантовой теории, и потому при изменении ее математических основ такие формулировки уже нельзя будет

[9]Речь идет о методе коллективного поведения. В другой форме конструктивизма этот объект может иметь иной вид, но он необходим в любом случае.

считать абсолютно корректными. Мы обсудим это на примере трех задач: квантового решения задачи перебора, поиска спектра оператора и квантового криптографического протокола.

6.2.1. Конструктивная трактовка задачи перебора

Мы попытаемся проследить, какое влияние может оказать конструктивизация квантовой теории на возможные подходы к двум фундаментальным вычислительным задачам: задаче перебора и задаче поиска собственных частот оператора. В стандартном формализме для этих задач известны быстрые квантовые алгоритмы Гровера и Шора, которые были нами рассмотрены в предыдущей главе. Начнем с задачи перебора.

Задача перебора заключается в нахождении решений уравнения

$$f(x) = 1, \tag{6.5}$$

где $f : \{0,1\}^n \to \{0,1\}$ — есть булевская функция. Здесь, как мы знаем, есть две возможности относительно функции f: она может быть либо задана в виде схемы из функциональных элементов, то есть мы будем иметь полную информацию о ее конструкции, либо f задана в виде черного ящика, и тогда у нас нет никакой информации о структуре устройства, реализующего функцию f и мы можем только использовать его «вслепую», то есть как оракул. Ранее мы фактически не различали эти два случая, и нашим аргументом было то, что (в классической математике) невозможно использовать знание внутренней структуры устройства, реализующего функцию f для поиска решений уравнения (6.5). В конструктивизме нам придется пересмотреть этот тезис и рассмотреть два случая задания функции f раздельно. Я напоминаю, что вышеупомянутый аргумент не носил характера строгой теоремы, а был чем-то вроде опытного факта, то есть основывался на практике, наработанной в классической математике, хотя и относящейся к алгоритмам. Теперь, рассматривая ситуацию с конструктивных позиций, мы по-новому сформулируем условие задачи перебора в том случае, когда f задана в виде схемы из функциональных элементов.

Эта ситуация не вполне обычная и нуждается в более детальном обсуждении. Речь идет не об автоматическом применении конструктивной математики, а об интерпретации физической структуры конкретного алгоритма, задающего f с позиций конструктивной физики. Мы предполагаем, что квантовая физика уже конструктивизирована, и пытаемся понять, что это означает для решения переборной задачи методами конструктивной квантовой механики.

Оказывается, что задача перебора с точки зрения конструктивной физики может допускать еще более быстрое решение, чем дает алгоритм Гро-

вера для стандартной квантовой теории. Это решение, в принципе, может даже иметь сложность $O(n)$, что составляет логарифм от классической сложности решения задачи перебора. Такое ускорение может быть достигнуто только с помощью фактического пересмотра формального условия задачи перебора. Это действительно результат пересмотра формальной постановки задачи перебора, а именно конструктивное понимание того, что означает наличие схемы из функциональных элементов, реализующей функцию f.

Я подчеркиваю, что речь здесь идет не о твердо установленном факте, что переборную задачу можно решить за время $O(n)$, а о гипотезе. Эта гипотеза относится не к классической теории алгоритмов, где этот вопрос эквивалентен фундаментальной проблеме $\mathcal{P} = \mathcal{NP}$?, а к пониманию действия устройства с позиций конструктивной квантовой физики. Гипотеза состоит в том, что **любое физическое устройство Y_f, реализующее функцию f, должно содержать информацию о тех множествах аргументов, на которых эта функция принимает любое из своих значений.** В частности, в схеме функциональных элементов, задающей f, обязана содержаться информация о решениях уравнения (6.5). Эта информация должна иметь совершенно физическую форму, и вопрос состоит только в том, каким образом ее извлечь. При этом такая информация становится реально доступной только в тот момент, когда мы запускаем Y_f на каком-либо конкретном значении аргумента x.

Предположим, что логическая часть квантового компьютера состоит из n частиц, так что роль j-го кубита играет состояние, в котором может находиться любой из экземпляров j-й частицы. Мы условно обозначим эти состояния через $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Тогда квантовые вычисления построены именно на этих состояниях, так что мы можем применить к ситуации конструктивный формализм. Тогда мы должны рассмотреть сетку, в которую входят нити, объединяющие экземпляры частиц $1, 2, \ldots, n$ в кортежи вида

$$s_1, s_2, \ldots, s_n. \tag{6.6}$$

Поскольку у нас нет никаких других объектов, переносящих информацию, и мы считаем, что вся информация материальна, то надо признать, что **если решений уравнения (6.5) мало, то некоторый кортеж вида (6.6) соответствует некоторому решению уравнения (6.5)**. Это означает, что ответ на интересующий нас вопрос уже имеется в сетке, соответствующей состоянию наших n частиц после однократного запуска f.

Эту парадоксальную ситуацию можно пояснить и на примере стандартных квантовых вычислений. Рассмотрим оператор Гровера $G = -I_{\tilde{0}} I_{jtar}$. Квантовый алгоритм быстрого перебора есть применение G^{t_q} к

состоянию $|\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} |j\rangle$. Если мы немного изменим $|\tilde{0}\rangle$, обнулив коэффициент при целевом состоянии j_{tar}, то есть будем считать, что $|\tilde{0}\rangle = \sqrt{\frac{1}{N-1}} \sum_{j \neq j_{tar}} |j\rangle$, то при этом немного изменится и оператор Гровера, тогда и то и другое изменение при больших N будет совершенно не заметно, то есть мы не сможем обнаружить эти изменения с помощью локальных измерений. Однако теперь применение оператора G^{t_q} ничего нам не даст! Алгоритм уже не будет работать. То есть для того, чтобы получилось j_{tar}, в результате действия гроверовского алгоритма, коэффициент при $|j_{tar}\rangle$ в $|\tilde{0}\rangle$ должен быть ненулевым.

Получить $|\tilde{0}\rangle$ очень просто. Надо применить $H^{\otimes n}$ к $|0\rangle$. Представим себе, что существует зерно амплитуды, так что на самом деле в том состоянии, которое мы принимаем за $|\tilde{0}\rangle$, нет не просто $|j_{tar}\rangle$, но и львиной доли возможных состояний $|j\rangle$. Ни прямое измерение, ни метод квантовой томографии не позволит нам обнаружить такого несоответствия. Для обнаружения подлога надо не просто иметь экспоненциально большой запас времени. Надо абсолютно точно знать, что все состояния, которые мы считаем за $H^{\otimes n}|0\rangle$, одинаковы. Наличие зерна амплитуды сразу сделает эти состояния различными при каждой генерации, и мы не сможем этого обнаружить! Есть только один способ решить вопрос о качестве $|\tilde{0}\rangle$ — запустить алгоритм Гровера. Безупречная работа быстрого квантового алгоритма — единственный способ верификации квантовой теории в многочастичной области. Никакие обходные пути не могут заменить быстрого квантового алгоритма. Но если запуск GSA не дает однозначного ответа, то конструктивная модификация квантовой теории делается неизбежной. Это влечет и соответствующий пересмотр задач квантовой информатики.

Можно было бы трактовать задачу решения уравнения (6.5) так. Пусть у нас есть таблица вида

$$l,\ f(l),\ l = 0, 1, 2, \ldots, 2^n - 1, \tag{6.7}$$

задающая функцию f. Тогда применение функции f к заданному значению $x = l$ означало бы просто, что мы выбираем конкретную строку в таблице (6.7). Но это не соответствует конструктивной форме квантовой теории, поскольку таблица (6.7) имеет экспоненциальный объем. Мы должны считать, что в таблицу (6.7) входят не все строки вида l, $f(l)$, а только те, что соответствуют «редким» значениям функции f; в частности, если нас интересует решение уравнения (6.5) и 1 не является преобладающим значением среди других значений функции f, то именно строка с $f(l) = 1$ должна

входить в таблицу (6.7) после попытки получить ходя бы одно из значений функции f. Эта постановка радикально расходится с традиционной, так как у нас получается, что искомое нами решение задачи уже содержится в ее постановке,[10] и нам надо только извлечь его из начального состояния системы или из состояния, близкого к начальному (полученного после однократного обращения к функции f на любом ее аргументе). Но именно такая переформулировка ждет традиционные задачи квантовой информатики при конструктивизации самой квантовой теории.

В конструктивной квантовой физике, по существу, останется только одна задача: построение все более детальных моделей сложных процессов. Все остальные задачи будут полностью подчинены ей.

Если нам нужно будет (для чего-то) решить уравнение (6.5), в конструктивизме нам придется анализировать не столько функцию f, сколько это «что-то».

Эта неожиданная ситуация может быть проиллюстрирована и на традиционном примере с кошкой Шредингера, которая сидит в замкнутом ящике, так что ее жизнь или смерть зависит от поглощения или непоглощения одного-единственного фотона, который может быть задетектирован неким детектором, который, в свою очередь, запускает сложную цепочку химических реакций, переходящих в механическое движение, приводящее к гибели животного. В результате жизнь и смерть кошки оказывается в запутанном ЭПР-состоянии с состоянием фотона. Стандартное описание этой ситуации ведет к тому, что кошка, в принципе, может быть переведена из «мертвого» состояния в «живое» и обратно, и к тому подобной ахинее.

В конструктивизме эта ситуация имеет совершенно рутинную форму. Состояние кошки и всей этой сложной системы, на которую (якобы) влияет один-единственный фотон, описывается сеткой экземпляров частиц, в нее входящих, так что вопрос становится примерно таким же, как если бы никаких фотонов не было бы вообще, и все решается, по-видимому, задолго до того, как начнутся движения механических частей. То есть сам организм кошки, по всей вероятности, вообще не будет иметь никакого способа повлиять на происходящее,[11] и эксперимент, таким образом, лишается всякого научного смысла, а вместе с ним и этического прикрытия.

Все практические задачи, приводящие к решению уравнений типа (6.5), имеют чисто физическую формулировку, которая сводится к моде-

[10] Так же, как $|j_{tar}\rangle$ уже содержится в $|\tilde{0}\rangle$.

[11] Иная ситуация, в принципе, не исключаемая полностью, была бы, тем не менее, редчайшим феноменом: макроскопическим проявлением наличия очень длинных связей, соединяющих экземпляры частиц в организме кошки с экземплярами частиц, входящих в лазер. Такие феномены носят индивидуальный характер и не поддаются изучению статистическими средствами, направленными как раз на исключение их из рассмотрения.

лированию некоего реального процесса, которое и должно осуществляться методами конструктивной физики, после чего, если дело дойдет до некоего аналога уравнения (6.5), мы вместо этого уравнения будем иметь такое уравнение с рядом ограничений, плюс массу других дополнительных условий на функцию f, вроде тех, которые входят в задачу структурного поиска (см. приложение). В любом случае у нас будет в распоряжении кортеж вида (6.6), дающий нужное нам решение, правда, находящийся среди других подобных кортежей. В этом случае мы могли бы, по крайней мере, в принципе, рассчитывать на нахождение искомого нами кортежа (6.6) методом прямого перебора, так как число всех таких кортежей при наших требованиях к моделям, не должно превышать числа экземпляров одной-единственной квантовой частицы. Иными словами, наложенные нами на модели требования, при их выполнении, должны давать решения возникающих на практике переборных задач за линейное время $O(n)$. Здесь сложность считается для клеточно-автоматной модели вычислений, в которой можно моделировать сети экземпляров частиц; в других моделях сложность будет полиномиальной.

Итак, речь не идет об ускорении решения переборных задач на квантовом компьютере. Такое ускорение противоречило бы известным результатам работ [8, 13, 30, 31, 45] и другим. Речь идет совсем о другой возможности: формулировки переборных задач, возникающих при решении задач практического моделирования, могут быть таким образом уточнены в конструктивной квантовой теории, что они будут допускать очень быстрое решение — гораздо более быстрое, чем решение их в стандартных формулировках на квантовом компьютере.

6.2.2. Влияние физического конструктивизма на квантовую криптографию

Удивительным фактом является то, что влияние конструктивизма на квантовую криптографию может оказаться, в некотором смысле, противоположным его влиянию на квантовый компьютинг![12] Возможность построения моделей больших систем может дать и совершенно новые возможности атак на информацию, что окажет непосредственное влияние на квантовую криптографию. Конструктивизм квантовой теории скорее усиливает сторону криптографического нападения, чем защиты, причем новыми объектами этого нападения будут не каналы связи, а сами общающиеся субъекты (Алиса и Боб).

[12]Что вызывает мое глубокое удовлетворение, так как в этой игре мои симпатии всегда были на стороне Евы.

Эта удивительная особенность квантового конструктивизма имеет общий характер и не зависит от деталей криптографических систем, например, от квантовых протоколов. Возможность построения настоящих моделей сложных процессов всегда играет в пользу открытия информации и против ее защиты. Но это вовсе не означает, что криптография потеряет свою важность; напротив, ее роль только возрастет. Причина этого не только в обострении противоборства Алисы и Боба с Евой, если последняя получит более мощное вооружение. Главная причина — в возрастании роли информации и информационного обмена как такового. Если в стандартной квантовой физике зона проникновения информационных систем ограничена стандартным формализмом и мы, например, не можем ничего сказать о результатах измерения, то в конструктивизме ситуация немного меняется: конструктивизм дает некоторые принципиальные инструменты для получения несанкционированного доступа к информации, которые мы вкратце и рассмотрим. Их нельзя использовать в традиционных устройствах, построенных на статистическом сглаживании феноменов, к которым могут относиться эти инструменты. Но само их наличие дает принципиальную возможность использования таких феноменов, проявляющихся в сложных системах. Это означает, что в конструктивизме связь информации с реальными процессами определенно более глубока, и это сразу повышает ее ценность.

Мы будем рассматривать не криптографию, занимающуюся защитой данных при их передаче по каналу связи, а более широкую задачу информационного обмена, включающую: а) генерацию секретной информации, и б) ее передачу по каналу связи. Заметим сразу, что квантовый канал передачи информации защищен очень надежно (см., например, [10, 62]) и атаки на него не имеют большого смысла. Уязвимое место в системе информационного обмена представляет генерация секретной информации, что можно назвать термином «принятие решения».

Для полноты картины покажем сначала источник секретности квантовой криптографии на примере основного протокола BB84. Здесь Алиса с Бобом должны либо генерировать секретный ключ $k_1, k_2, \ldots, k_l$, где $k_j = 0, 1$; $j = 1, 2, \ldots, l$, который не будет знать никто другой кроме них, либо задетектировать присутствие подслушивателя в канале связи. Подслушиватель традиционно называется Евой. Протокол состоит в следующем. Алиса на каждом шаге j выбирает один из базисов:

$$\begin{aligned} &B1: \quad |0\rangle,\ |1\rangle, \\ &B2: \quad |\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle),\ |\tilde{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle); \end{aligned} \tag{6.8}$$

если выбран базис $B1$, то посылает Бобу состояние $|k_j\rangle$, а если выбран базис $B2$ — то состояние $|\tilde{k}_j\rangle$. После получения всех кубитов Боб измеряет свои кубиты в произвольных базисах. В примерно половине случаев выбранный Бобом базис совпадет с тем, что выбрала для этого j Алиса. После этого Алиса и Боб открывают друг другу (по открытому каналу) свой выбор базиса для каждого из кубитов, и Алиса сообщает Бобу значения k_j для небольшого числа j, которые выбираются Алисой наугад. Боб сверяет эти значения с полученными им при измерениях значениями k_j из числа тех избранных Алисой значений j, для которых у них совпали базисы. Полное соответствие значений Алисы и Боба для таких k_j говорит об отсутствии Евы в канале связи. После этого Боб может пользоваться теми значениями k_j, для которых его базис совпал с базисом Алисы, — это и будет секретный ключ, который знают Алиса и Боб и который недоступен Еве.[13]

Предположим, что Ева атакует канал связи, перехватывая фотоны, летящие от Алисы к Бобу. Для того чтобы извлечь содержащуюся в них информацию, Ева должна измерить состояние фотона. Поскольку базисы (6.8) Еве известны (как и вся информация о протоколе, за исключением только самих чисел k_j), она будет измерять состояния фотонов в одном из этих базисов. Так как она не знает выбор базиса Алисой, она будет выбирать базис произвольно (здесь используется недоступность для Евы датчика случайных чисел, находящихся в распоряжении Алисы) и в примерно половине тех значений j, в которых этот выбор совпадет у Алисы и Боба, у Евы будет выбран иной базис. После измерения Евой состояния оно неизбежно испортится, и Алиса с Бобом сразу определят присутствие Евы в канале связи, так что их цель будет достигнута.

Секретность криптографического протокола базируется фактически на одном тезисе, лежащем в основе стандартной квантовой теории. Это — невозможность предсказания возможного результата измерения квантового состояния с большей достоверностью, чем дает борновское распределение вероятностей.[14] Для двух исходов $|0\rangle$ и $|1\rangle$ результатов измерения в нашем случае борновское распределение даст равновероятные исходы: каждый с вероятностью $1/2$. Мы видим, что попытка получения информации путем атаки на канал связи является практически бессмысленной.

Итак, уязвимым местом в системе информационного обмена является

[13] В реальных протоколах используют еще очистку и сжатие ключа для повышения секретности.

[14] Это вытекает из запрета на квантовое клонирование. Не существует такого унитарного оператора U, действующего на регистр и такую же по длине анциллу, что для любого состояния $|\Psi\rangle$ $U|\Psi\rangle|0\rangle = |\Psi\rangle|\Psi\rangle$. Этот простой факт доказывается от противного, с подстановкой вместо $|\Psi\rangle$ двух ортогональных состояний и их суперпозиции.

не канал передачи данных, а система принятия решения, и объектом атаки Евы должна быть только Алиса как активный субъект этой системы. Для начала нам надо яснее сформулировать эти правила для криптографии. Мы предполагаем, что Ева знает обо всех деталях протокола, за исключением источника случайности при выборе базиса Алисы, который, условно говоря, черпается из совершенно независимого источника, например, из некоторой секретной области космоса. Такой источник можно считать наследственным знанием Алисы, который недоступен никому, кроме нее; такой же источник имеется у Боба и у Евы.[15] При этом случайность наследственного знания не имеет никакого значения; важно только то, что он не доступен никому, кроме его обладателя. В задаче квантовой криптографии Еве недоступен также и сам секретный код.

Теперь мы можем, по аналогии, сформулировать правила игры для более широкой задачи квантового информационного обмена. Здесь у нас есть два участника, Алиса и Ева, где первый принимает решение, а второй должен получить о нем максимум информации. У каждого участника есть свое наследственное знание, которое является классическим кодом, не доступным никому, кроме его обладателя. Так как решение Алисы есть некий код из нулей и единиц, который интересует Еву, мы должны предполагать, что он ее непосредственно касается. Иными словами, существует некоторый физический ансамбль $\mathcal{E}$, к которому Алиса и Ева имеют равноправный доступ, так что Алиса использует информацию из $\mathcal{E}$ для принятия своего решения. Алиса и Ева могут использовать $\mathcal{E}$, только детектируя частицы, исходящие из $\mathcal{E}$, или посылая в $\mathcal{E}$ эмитируемые ими частицы; будем для простоты считать все такие частицы фотонами.

Поскольку целью Алисы является генерация не доступного Еве ключа, ее решение о содержании этого ключа она старается, по возможности, скрыть. Для этого у нее есть единственная возможность: предотвратить перемещение любого вещества (фотонов) из зоны ее контроля вовне, например, в $\mathcal{E}$, до момента принятия ею решения. Будем считать, что в идеальном случае Алиса только детектирует поступающие к ней фотоны, но ничего не эмитирует вовне.

При этом, в силу принципа неразличимости фотонов, у Алисы нет никакого способа отличить фотоны, которые генерирует источник $\mathcal{E}$ сам по себе, от фотонов, которые посланы туда Евой. Ева имеет, таким образом, возможность посылать в $\mathcal{E}$ одну половину бифотона, сохраняя у себя другую половину, а Алиса будет детектировать посланный Евой фотон, не имея возможности определить наличие у него компаньона. Мы предполагаем,

[15] На практике в качестве наследственного знания его обладатель может просто использовать фотоны, приходящие из какой-либо области космоса, известной только ему одному.

что извлечение информации из фотона производится его детектированием. При этом субъект, принимающий фотон, может устанавливать положение детектора, используя свое наследственное знание.

«Черный ход» в данном информационном обмене основан на существовании административной системы, которую мы здесь, для простоты, будем представлять просто как множество элементарных исходов Ω для любых квантовых измерений. Именно Ω будет использован Евой для получения информации о решении, принятом Алисой. Хотя у участников игры и нет непосредственного доступа к Ω, само существование этого объекта создает совершенно новую ситуацию, по сравнению с классическим вариантом этого обмена. Смысл Ω в том, что информация в этой административной системе может перемещаться в обратную сторону по сравнению с перемещением вещества, что мы уже видели на примере нарушения неравенства Белла, и над динамикой Ω Алиса не властна.

Каким образом Алиса генерирует свою секретную последовательность нулей и единиц? Процесс генерации в общем случае имеет вид

$$G_1 \to G_2 \to \ldots \to G_m,$$

где всякое изменение $G_i \to G_{i+1}$ состояния Алисы и ее окружения, влияющего на генерацию этой информации, может быть либо детерминированным (основанным на наследственном знании Алисы), либо случайным (основанным на информации, полученной Алисой от $\mathcal{E}$). Примем, что начальное состояние G_1 есть наследственное знание Алисы и Еве не известно, но правила изменения G_i ей известны (как ей известен криптографический протокол), так что единственным формально открытым для атаки местом генерации исходного кода являются те из переходов $G_i \to G_{i+1}$, в которых используется элемент случайности. Заметим, что предположение об известности всех шагов, которые предпринимает Алиса при выработке своего решения, является чисто конструктивным и вытекает из нашего главного тезиса об алгоритмизируемости любого физического процесса. Таким образом, неизвестным может быть только начальное состояние и информация, поставляемая оракулом, роль которого играет наследственное знание Алисы.

Мы знаем, что источником любой случайности является проявление квантовой природы окружающего мира. Поэтому случайный переход $G_i \to G_{i+1}$ можно представлять себе в любом случае как получение информации от $\mathcal{E}$, что в квантовом случае означает измерение некоторого квантового состояния $|\Psi_{Alice}\rangle$ какого-то квантового ансамбля S_{Alice}, полученного Алисой от $\mathcal{E}$. Что произойдет при измерении $|\Psi_{Alice}\rangle$? Ансамбль S_{Alice} может находиться в запутанном состоянии $|\Psi_{Alice,\ Eve}\rangle$ с неким неизвестным

Алисе ансамблем S_{Eve}, находящимся в распоряжении Евы. Теперь ситуация совершенно не похожа на квантовый криптографический протокол. Предположим, что Ева знает базисы, в которых проводит измерения Алиса, и если $|\Psi_{Alice,\ Eve}\rangle$ есть состояние ЭПР-типа, она может в точности узнать результат случайного числа, полученного Алисой в результате измерения.

Но предположим, что Алиса использует свое наследственное знание для выбора базиса, в котором она производит измерения. Если выбор производится, например, из наблюдаемх σ_x и σ_z, то Ева может, используя свое наследственое знание в качестве источника случайности, в точности разыграть ситуацию с нарушением неравенства Белла, которую мы рассматривали выше, и получить, например, последовательность нулей и единиц, обладающую большей комплементарностью с аналогичной последовательностью Алисы, по сравнению со случаем классической корреляции. Итак, квантовые состояния объектов информационного обмена дают возможность более эффективной атаки на систему принятия решения, по сравнению с классическими.

Надо сказать теперь о прикладной и этической стороне задачи информационного обмена. Обычно задача защиты информации в криптографии неявно трактуется как оборона от агрессии. Это — большая ошибка. Криптография по своей суги является инструментом нападения, ибо она скрывает замысел Алисы и Боба, затрагивающий интересы Евы. Поэтому расширение криптографической задачи до задачи организации информационного обмена позволяет Еве защитить свои интересы от такой агрессии на ранних стадиях принятия решения. Установленные нами правила информационного обмена являются симметричными и явно включают интересы обеих сторон, в отличие от ассимметричных условий криптографии, где источник передаваемого по каналу ключа скрыт от рассмотрения. Поэтому данная игра, которую мы сформулировали как «черный ход» в криптографии, является иллюстрацией важности квантового конструктивизма.

6.3. Резюме конструктивной модификации квантовой теории

Конструктивная квантовая теория исходит из разделения модели на пользовательскую часть, описывающую возможные эксперименты с реальными объектами, и административную часть, служащую для построения визуальных моделей реальности и содержащую элементарные исходы Ω. Время, которое тратится на коммуникации между разными частями Ω, является целиком административным и пользователю не доступно, что и является причиной квантовой нелокальности. Аппарат унитарных эволюций

и матричная алгебра правильно описывает реальную эволюцию только в вероятностном смысле, так как квантовые амплитуды, которыми этот аппарат манипулирует, являются объектом исключительно статистической природы.

Точность «предсказаний» стандартной квантовой теории основана, таким образом, исключительно на массовом характере рассматриваемых эволюций, при котором так называемые «редкие» события оказываются за рамками рассмотрения. Поэтому эта точность проявляется только для простых систем, в которых роль сложных запутанных состояний — запутанность с окружением — нивелируется при большом числе однородных испытаний. Измерение в стандартной трактовке является, таким образом, процессом принципиально иной природы, по сравнению с унитарной эволюцией, так что его невозможно представить как унитарную эволюцию ни при каком расширении рассматриваемой системы.

Конструктивная квантовая теория явно манипулирует с административной частью модели, что позволяет описывать унитарную эволюцию точечной частицы в терминах конечного роя, а системы реальных частиц — в виде сети, то есть роя их экземпляров, объединенных связями в кортежи. Динамика сети при большом числе экземпляров всех реальных частиц и, соответственно, при малом зерне пространственного разрешения dx будет служить приближением точного решения уравнения Шредингера для такой системы с точностью до dx.

Конструктивный математический анализ дает общее математическое обоснование перевода всех аналитических приемов, используемых в теорфизике, равно как и понятие волновой функции (формально отсутствующее в конструктивной квантовой теории) на алгоритмический язык. Так, при изучении малой системы, в которой есть смысл говорить о волновой функции и измерении, по любому приближению начального значения волновой функции $|\Psi(0)\rangle$ с помощью роя $S(0)$ мы эффективно находим соответствующее приближение результирующей волновой функции рассматриваемой системы $|\Psi(T)\rangle$ с помощью роя $S(T)$. При рассмотрении же большой системы (малая плюс ее окружение) «знание» экспериментатора об исходе «измерения» малой системы определяется в точных терминах конструктивного анализа: как очередное приближение искомой амплитуды, полученное некоторым алгоритмом. При этом мы не можем сказать, что же алгоритм выдаст нам на том или ином шаге, пока мы его не выполним реально. Реальные элементы Ω (состояние экземпляров роя, влияющее на результат работы моделирующего алгоритма, то есть, в пределе, на применимость его к данному входу) оказываются, тем самым, недоступными пользователю. Этот факт вытекает из невозможности алгоритмического распознавания применимости алгоритма к данному входному слову. То, что в копенгаген-

ской квантовой физике является постулатом «отсутствия скрытых параметров», в конструктивизме есть следствие теории алгоритмов.

На практике количество экземпляров диктуется возможностью построения правильного динамического сценария. При этом закон сохранения энергии определяет типы дискретных перемещений экземпляров роев, а также моменты испускания и поглощения фотонов. Таким образом, ограниченность числа экземпляров реальных частиц есть встроенный фактор декогерентности при конструктивном описании квантовой динамики. Такая декогерентность резко возрастает при росте числа рассматриваемых частиц. При формировании длинных кортежей в результате ограниченности роев экземпляры перераспределяются так, что остаются только те, для которых участок, соответствующий малой системе, один и тот же. Это и есть «измерение» малой системы ее окружением. Таким образом, при конструктивной трактовке, измерение, как и всякая декогерентность, есть результат ограниченности роя. Испускание и поглощение фотонов есть тоже следствие ограниченности роя для каждой реальной частицы.

В сложных системах именно конструктивный язык позволяет дать истинное описание динамики, так как он полностью наследует фундаментальную основу квантовой механики — запутанные состояния. Конструктивное описание не опирается на статистическую обработку результатов отдельных экспериментов, которую невозможно произвести для сложных систем. В больших и неоднородных ансамблях главную роль играют как раз те редкие события, которые считаются проявлением «квантового хаоса» в стандартной теории и отбрасываются для получения численных результатов в простых экспериментах. Конструктивный подход для сложных систем, наоборот, отбрасывает статистическую обработку на отдельных шагах ради получения верного результирующего сценария.

Такой сценарий, тем не менее, не должен быть предметом произвола. Его надо строить, исходя из эвристики коллективного поведения, с использованием таких понятий, как тонкий слой. Это даст возможность достичь области сложных объектов, сохранив ядро квантового описания — динамику роя и запутанных состояний — для того чтобы применять в этих новых условиях также и эвристику других частей естествознания, например, эволюционный принцип.

Глава 7
Программный контейнер естествознания

Главное преимущество метода коллективного поведения в конструктивной квантовой механике состоит в его потенциальной масштабируемости на очень большие системы. Это позволяет говорить о возможности создания более универсальной программы, предназначенной для моделирования таких систем, которые изучаются не в квантовой теории, а в химии и даже в биологии. Такую гипотетическую программу мы будем называть программным контейнером естествознания (ПКЕ). Этот проект, в отличие от конструктивизации физики, пока стоит несколько дальше от практической реализации, поскольку он затрагивает сразу несколько других дисциплин. И хотя все мы верим в бесспорное главенство законов физики, в этих дисциплинах тоже есть своя идеология, с которой нельзя не считаться.

Тем не менее, ПКЕ важен, потому что для построения алгоритмов конструктивной физики критически необходима эвристика, лежащая в их основе, и эта эвристика должна быть одинакова для разных областей естествознания. Здесь мы обсудим перспективу создания ПКЕ и некоторые из практических приемов, которые могут быть для этого применены.

7.1. Актуальность ПКЕ

Развитие всех естественных дисциплин сопровождается постоянным появлением новых разделов фундаментальных знаний. Это ведет к геометрическому росту научной информации, что можно очень легко понять, анализируя объем статей в электронных архивах и их динамику. Такой количественный рост с необходимостью сопровождается падением качества научных публикаций, поскольку их просто некому должным образом читать, а, значит, отсутствует необходимая для прогресса обратная связь. Другим проявлением этого является постоянно возрастающая степень специализации областей естествознания, делающая типичной такую ситуацию, при которой специалисты в одной области не понимают специалистов в другой,

даже если эти области объективно близки или изучают одно и то же, но с разных сторон. Надо особенно подчеркнуть, что эта ситуация объективна. Ее нельзя изменить, пытаясь установить некие фильтры или повысить требовательность к отбору публикуемого материала. Моей целью здесь не является анализ этой проблемы, отмечу лишь, что она очень глубока и без ее, хотя бы частичного, решения ожидать дальнейших результатов от естествознания бессмысленно. Для нас будет важно только то, что для такого решения должно быть затронуто само содержание естественных наук. Никакие внешние административные меры не способны решить обозначенную серьезную проблему, поскольку направление развития, в том числе и характер возможных экспериментальных прорывов, диктуется самим содержанием данной области знания.

Мне представляется правильным формирование на основе фундаментального знания интегрированных программных решений, пригодных как для технических приложений, так и для развития самого знания. Такие решения должны базироваться на открытом программном коде; только так можно обеспечить возможность для необходимой проверки результатов моделирования. Для систем любого уровня сложности имеются совершенно особые динамические сценарии, не сводящиеся непосредственно к сценариям для низших уровней. Будем измерять сложность системы в количестве частиц, из которых система состоит. Есть определенные сценарии для одной частицы. Но если рассмотреть две частицы, мы получим совершенно новые эффекты, не сводящиеся просто к одночастичным эффектам, например, существование запутанных состояний. Если рассмотреть 3 частицы, то мы опять получим иные эффекты, не сводимые к двухчастичным. Например, любое запутанное состояние двухчастичной системы имеет, как известно, шмидтовский тип, а для трех частиц это уже неверно. Если рассмотреть 10 частиц, мы снова обнаружим принципиально новые эффекты, это же произойдет, если рассмотреть затем 100 частиц, 1 000 и т. д. Попытка понять, как устроена сложная система, не рассматривая предварительно простые системы, является безрассудством.[1] Напротив, любой реальный прогресс, даже для таких очень сложных систем, как живые организмы, связан с рассмотрением более простых частей, из которых состоят исследуемые системы (список примеров столь велик, что читатель может привести их сам).

С другой стороны (как мы видели на примере принципа неопределенности), влияние сценариев малых пространственных масштабов может

[1] Например, невозможно построить модель даже самого простого живого существа, не привлекая для этого всю известную физику, если мы, конечно, имеем в виду именно модель, а не 3D-анимацию, — анимация может иметь только рекламную, но не научную ценность.

иметь глобальные последствия. Так и поведение большой системы может принципиально зависеть от сценариев для небольшого числа элементарных частиц. Поэтому мы не можем автоматически разделить модель сложной системы на «ярусы», соответствующие масштабам сценариев, как это делается в областях применимости классической математики (дифференциальных уравнений), например, в теории сплошных сред.

Но можно ли последовательно провести эту идею полной иерархии систем, начиная с элементарных частиц до сложнейших систем? Мы сейчас абстрагируемся от технических трудностей, неизбежных при попытках реализовать эту идею практически. Вопрос касается принципиальной осуществимости такого пути. Это является заведомо невозможным при традиционном взаимодействии естественных дисциплин, в силу того, что их традиционное разделение как раз и связано с принципиальным разграничением их сфер. Я думаю, что современные программные методы дают нам возможность преодолеть это препятствие.

7.1.1. О неудовлетворительности сжатия данных

Поскольку мы сталкиваемся с задачей жесткой экономии памяти, рассмотрим сначала существующие методы сжатия данных, в надежде извлечь из них пользу для нашей задачи. Что будет, если мы просто оцифруем все известные научные приемы и попытаемся их использовать в таком виде? Предположим, что нам надо компактно записать некоторое слово L в алфавите $\{a_1, a_2, \ldots, a_k\}$. Введем дополнительный алфавит $a_{k+1}, a_{k+2}, \ldots, a_l$ и будем записывать замены переменных с использованием этих дополнительных букв. Пусть на нулевом шаге (базис) у нас имеется только исходное слово $L = L_0$. На шаге j у нас будет иметься слово L_j в расширенном алфавите и система равенств в словах вида $a_g = a_d a_m$. Шаг нашего процесса будет состоять в том, что в слове L_j мы производим замену всех вхождений слова вида $a_d a_m$ на a_g и вводим равенство $a_g = a_d a_m$ в нашу систему. Договоримся делать эту операцию в том и только в том случае, если в результате происходит уменьшение общей длины слова и равенств.

Используя этот прием, можно легко закодировать некоторые регулярные грамматики, например, результаты замен вида $a \to ab$, $b \to ba$. Существующие программы сжатия файлов используют описанную схему. Тем не менее, сжатое таким образом слово становится нефункциональным. Действительно, данный метод сжатия игнорирует тот факт, что буквы a_d и a_m при выписанной замене могут принадлежать вхождениям в слово, имеющим различную функциональность. Таким образом, при данном типе сжатия невозможно будет эффективно работать со сжатым словом, что нам не

подходит, так как в нашем случае как раз функциональность является основной целью.

7.2. ПКЕ и скрытые параметры

Как мы видели, конструктивная форма запрета на скрытые параметры состоит в том, что **нам не может быть доступно априорное знание о результате измерения, потому что в противном случае мы могли бы распознать применимость алгоритма к произвольному входному слову.** Этот запрет мы сформулировали ранее как невозможность точного знания амплитуд квантового состояния, что равносильно невозможности определения равенства конструктивных вещественных чисел. Рассмотрим подробнее, какая физическая реальность стоит за таким запретом.

В терминах динамического диффузионного роя, скрытые параметры квантовой теории есть точные значения координат и импульсов экземпляров этого роя (в многочастичном случае экземплярами будут кортежи экземпляров отдельных частиц, которые мы назвали эвереттовскими квантовыми мирами). Динамика роя разворачивается в масштабах малых Δt, Δx, и только после усреднения по большим интервалам δt, δx даст приближение точного решения уравнения Шредингера, то есть стандартную квантовую механику.

В силу того, что описание в роевых терминах полностью масштабируемо и позволяет, при необходимости, включать в рассмотрение последовательные элементы окружения рассматриваемой системы, мы можем (потенциально) попытаться расширить эту систему до какого-либо живого существа. В предельном случае можно попытаться включить в нее и самого экспериментатора. Но здесь мы наталкиваемся на непреодолимое препятствие логического характера, которое вытекает из внутреннего противоречия, заключенного в понятии «моделировать систему». Это в точности то же противоречие, к которому мы придем, предположив возможность распознавания применимости алгоритмов, и которое связано с диагональным процессом, то есть самоприменимостью.

Мы приходим к следующему выводу. Настоящий смысл запрета на знание субквантовой динамики (т. н. скрытых параметров) вытекает из невозможности применения ее к самому экспериментатору. Но из этого следует также, что настоящей целью конструктивного подхода к физике являются не просто сложные системы, а системы, о которых можно утверждать (или предполагать), что они являются живыми в том смысле, что эти системы сами могут использовать такой инструмент, как моделирование реальности. Именно в этой области, непосредственно примыкающей к логиче-

ской невозможности, и следует ожидать главных плодов конструктивного подхода.

Из этого следует очень важный практически вывод. Мы не должны моделировать то, что называется хаосом. Наша цель — моделирование порядка, свойственного живой материи, и его возникновение (или выделение) из хаоса. Рассмотрим численную характеристику хаоса — энтропию фон Неймана квантового состояния с матрицей плотности ρ: $H = -tr(\rho \ln(\rho))$. Ее классический аналог — энтропия Шеннона $S = -\sum_j p_j \ln p_j$ — обладает свойством монотонности, когда при добавлении новых частей к рассматриваемой системе ее энтропия может только увеличиться. Энтропия фон Неймана квантовых состояний может уменьшиться при расширении системы. Это происходит в случае, когда к системе добавляются частицы, находящиеся в запутанном состоянии с самой системой. Например, квантовая энтропия чистого состояния $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ равна нулю, в то время как энтропия смешанного состояния, полученного измерением одного из кубитов, больше нуля. Таким образом, в реальной природе порядок может возникать из хаоса, именно из-за существования запутанных состояний рассматриваемой системы и ее окружения.

Второй пример возникновения порядка их видимого хаоса дает алгоритм Гровера (см. приложение). Там амплитуда, первоначально «размазанная» по всем состояниям, очень быстро концентрируется на искомом неизвестном состоянии; дальнейшая эволюция снова «размазывает» амплитуду по всем состояниям, и т. д. Процесс «размазывания» амплитуды является грубым кубитовым выражением расплывания волновой функции при ее унитарной эволюции, который рассматривался нами выше с помощью интегралов по путям. Практически это взрыв волнового пакета, «мощность» которого тем больше, чем сильнее степень первоначальной концетрации.[2] Однако получить так же естественно обратный процесс (концентрации амплитуды) не получится, так как невозможно обратить знак при операторе кинетической энергии $p^2/2m$ (в отличие от оператора потенциальной энергии, где обращение знака является чисто технической задачей). Не исключено, что реализация задачи «сжатия» волнового пакета может потребовать именно учета самих экземпляров в многочастичной сети, то есть чисто конструктивных моделей, в которых критическое значение будет иметь индивидуальность экземпляров, например, сочетание определенных значений импульсов отдельных экземпляров в одном мире.[3]

[2]Такой взрыв является самым элементарным в том смысле, что к нему сводятся все реальные взрывные процессы, быть может, за исключением ядерных и гравитационных.

[3]Можно пытаться также действовать в духе «стандартной» кубитовой техники, скажем,

Это явление является существенно релятивистским, поскольку предполагает переход всего роя для рассматриваемой системы в тонкий слой на этапе размазывания амплитуды и процесс конденсации тонкого слоя в обычный рой — на этапе ее концентрации.

Физический конструктивизм может помочь обнаружить такие явления на объектах реального мира; для этого понадобится его программное оформление — ПКЕ.

Построение масштабируемых моделей многочастичных систем является актуальной задачей и для сплошных сред. При выводе уравнений типа Навье–Стокса используется ряд предположений, не вытекающих непосредственно из динамики рассеяния отдельных атомов, которую мы рассматривали выше. Есть основания предполагать, что обоснование этих предположений требует применения метода коллективного поведения. Единственным известным фундаментальным фактором, который не учитывается в теории сплошных сред, являются запутанные квантовые состояния. Поэтому можно надеяться на успешное построение масштабируемых моделей именно после его учета.

7.3. О языке ПКЕ

Нашей ближайшей задачей будет создание общего формата для описания больших систем с помощью малой памяти, пригодного для моделирования их динамики. Как уже упоминалось, масштабирование наших моделей требует, чтобы необходимая для записи системы из n частиц память росла как $\log(n)$. Это требование является необходимым, так как в противном случае моделирование больших систем потребует таких же затрат, как и само их создание, что делает сам процесс моделирования бессмысленным.

Условие логарифмического роста памяти является гораздо более жестким, чем даже требование линейного роста памяти, наложенное нами ранее. Таким образом, мы должны моделировать в ограниченном объеме памяти поведение экспоненциально больших систем, что требует специальной идеологии.

За основу ПКЕ мы выберем пространственно-временную классификацию систем и процессов. Эта классификация предполагает построение сценариев на основе выбора зерна пространственного и временного разре-

концентрируя амплитуду с помощью связывания экземпляров длинными связями, например, объединяя частицы в твердое тело, где их положение будет локализовано, а затем разрушая эти связи фотонами. При этом освободившиеся частицы приобретут некоторую энергию от взрыва. Это похоже на возгонку молекул твердого тела, которые переходят в пар, минуя стадию жидкости.

шения, что полностью учитывает соотношение неопределенностей. Например, если мы выбрали очень малое зерно разрешения по пространству δx, то у нас имеется неопределенность в импульсе, равная $h/\delta x$, что означает потенциальное удаление объекта из зоны рассмотрения размера X за время $T = Xm/p = mX\delta x/h$. Тогда, выбирая зерно временного разрешения, меньшее этой величины, мы всегда можем обеспечить построение визуально различимых сценариев.

Вся рассматриваемая нами сложная система должна быть разделена на ярусы, так что внутри каждого из них составные части данного уровня должны описываться в каких-либо простых терминах, например, с помощью конечного автомата. Это разделение не обязательно связано с пространственной вложенностью частей, но его удобно представлять именно как пространственную вложенность. Итак, рассмотрим следующее деление пространства на последовательно вложенные кубы. Выберем зерно пространственного разрешения δr и разобьем пространство на кубы со стороной δr. Будем называть это разбиением нулевого уровня. Теперь объединим соседние кубы в большие кубы со стороной $2\delta r$. Внутри одного такого куба будет 8 кубов нулевого уровня. Назовем это разбиением первого уровня, и т. д. Мы можем сопоставить всякой точке трехмерного пространства ее координаты следующим образом. Возьмем самый маленький из кубов с начальной вершиной в некой фиксированной точке O, называемой нами началом координат, который содержит данную точку. Внутри этого куба найдем куб на единицу низшего уровня, который содержит данную точку. Положение этого куба внутри первого можно выразить тройкой бит, которую мы обозначим через E_1. Эта тройка фактически является очень грубыми координатами нашей точки внутри первого куба. Продолжая процесс деления кубов, получим тройку E_2, так что шестерка битов E_1E_2 будет давать приближение исходной точки с в два раза большей точностью, и так далее, пока не дойдем до максимально возможной точности δr, получив в итоге полные координаты нашей точки вида $E_1E_2 \ldots E_k$. Можно было бы делить ребро куба не на 2, а на большее число частей, но это принципиально ничего не меняет. В любом случае $k = \log |r|$, где $|r|$ есть расстояние нашей точки от начала координат. Введенная система координат является фактически кубитовым конфигурационным пространством для точек с точностью δr, которое мы уже рассматривали при моделировании квантовых систем. Сейчас мы посмотрим на него под несколько иным углом зрения.

Можно разбить кортеж $E_1E_2 \ldots E_k$ на несколько участков.

$E_1 \ldots E_{j_1}E_{j_1+1} \ldots E_{j_2} \ldots$, так что каждый участок $E_{j_l+1} \ldots E_{j_{l+1}}$ можно ассоциировать с некоторой естественной дисциплиной. Например, уровни с 1 по 30 можно ассоциировать с ядерной физикой, уровни с 30 по 60 —

с атомной физикой, с 60 по 80 — с химией, и т. д. Разумеется, такое деление будет приблизительным, так как здесь есть перекрывающиеся зоны. Но это деление хорошо тем, что оно абсолютно, то есть совершенно не зависит от избранной системы единиц; более того, его зависимость от деления ребра куба при переходе к низшему ярусу — только в линейном множителе.

Представим себе, что у нас есть огромное множество точечных объектов, каждый из которых имеет свои координаты в пространстве, и некоторый тип из конечного набора типов. Тогда каждому такому объекту мы можем приписать его координаты вышеописанным путем. Можно аналогичным образом приписать и скорости, имея в виду, что скорости также будут убывать с возрастанием уровня: в ядерной физике они самые большие, в атомной меньше, в химии — еще меньше, и т. д. Такие объекты будут представлять наименьшие известные частицы материи. Выбором δr можно добиться, чтобы координаты разных объектов были различными. Таким образом, вся сложная система будет оцифрована в виде множества координат $\bar{E}$ ее объектов. Этих объектов может быть, например, 10^{40} в рассматриваемой нами системе, но это потребует всего лишь примерно 120 уровней, то есть $k = 120$. Используя логарифмическую длину записи координат любого объекта, мы можем довольно экономным способом, используя только основные арифметические операции, закодировать такие процессы, как распространение волн, тепла, диффузионный процесс, и т. д. Для этого нужно рассмотреть конечно-разностную схему, представляющую соответствующее уравнение, и перевести эту схему в кубитовую форму, что не представляет особых затруднений для описанных классических процессов.

Таким образом можно, в принципе, погрузить в ПКЕ ту область, которую можно условно назвать механикой сплошных сред (именно погрузить, но это пока не даст принципиально новых путей исследования). При этом нам будет достаточно той организации ярусов некоторого уровня, которую предоставляет нам алгоритмы соответствующей дисциплины.

Рассмотрим моделирование квантового расплывания волновой функции свободной частицы, используя выражение для ее ядра (4.19). Разобъем пространство на кубики, как описанно выше. Нам надо получить все более и более точные приближения функции $e^{imx^2/2ht}$ в терминах нашей иерархии кубиков, то есть приближения функций $\cos(mx^2/2ht)$ и $\sin(mx^2/2ht)$. Это можно сделать, имея алгоритм последовательных приближений для таких функций, основанный, например, на их разложении в степенные ряды. На каждом уровне j у нас будут получаться некие функции $\mathrm{C}\bullet\mathrm{S}(\bar{E}^j)$, $\mathrm{SIN}(\bar{E}^j)$, где $\bar{E}^j$ есть приближение уровня j координаты аргумента. Таким образом, мы можем представить любой процесс, описываемый дифференциальными уравнениями.

Это кубитовое представление механики сплошных сред, так как мы отождествили кубиты с разрядами координат $\bar{E}$ в конфигурационном пространстве. Ядро является волновой функцией свободной частицы в момент времени t при условии, что ее состояние в начальный момент 0 в координатном представлении есть дельта-функция, сосредоточенная в начале координат. Мы видим, что чем меньше t, тем быстрее происходят осцилляции при фиксированном значении x. Таким образом, мы имеем процесс, который невозможно моделировать в реальном времени в смысле последовательных приближений от грубого к более точному, как, например, ассоциацию молекул, рассмотренную выше. Здесь чем меньше время t, тем более точное приближение на всем пространстве мы должны взять, чтобы получить правильную картину. Это означает, что мы не можем использовать метод последовательных приближений в реальном физическом времени и должны использовать модель динамических сценариев и отбора этих сценариев, что было описано выше. При отборе сценариев мы обязаны делать проход по кубитовой координате частицы $\bar{E}$ в пределах, определенных рассматриваемым взаимодействием (например, для атомной физики это $30 \leqslant j \leqslant 60$) и потом, сравнивая сценарии, производить отбор, уточняющий нужные нам значения (например, поведение волновой функции в удаленных точках, как для разлета свободной частицы). Как мы условились выше, время, потраченное на обработку отбора сценариев, является административным, а не реальным временем, и именно в ПКЕ это проявляется в полной мере.

Дальнейшее масштабирование модели основано на явном представлении квантовой запутанности в виде связей между экземплярами реальных частиц. Эти экземпляры могут находиться на совершенно разных уровнях кубитовой иерархии, и для реализации сети нам придется в любом случае путешествовать по разным уровням кубитовой иерархии для обработки сети. Время, потраченное на такие путешествия, также не может быть отнесено к реальному физическому времени и считается нами административным.

Кубитовые пространственные координаты не являются единственной формой хранения массива частиц, составляющих сложную систему. Можно применять тот же принцип не к пространственной вложенности кубов, а к самим частицам, способным объединяться в большие частицы — по иерархическому принципу. Этот способ отличается от пространственной иерархии так же, как лебеговская схема интегрирования от римановской, что аналогично ситуации с описанием многочастичных ансамблей при помощи сети (см. выше). Рассмотрим простой пример системы из 10000 одинаковых атомов ферромагнетика, объединенных в неправильную кристал-

лическую решетку, состоящую из 100 кластеров, по 100 атомов в каждом, и подвергающуюся действию сильного магнитного поля. Первоначальная ориентация спинов этих атомов, обусловленная преимущественной ориентацией спинов электронов из неполностью заполненных орбиталей, нам неизвестна. Если мы изучаем процесс установления ориентации спинов атомов под действием приложенного поля, мы можем считать, что первоначальные ориентации спинов внутри каждого кластера совпадают. Если это на самом деле не так, мы можем, произвольно поменяв их ориентацию, провести моделирование заново, убедившись, что это не влияет на ответ.

Аналогично при исследовании сложной биохимической реакции мы можем считать, что все входящие в ее реагенты атомы водорода находятся в одинаковых состояниях, кроме малого числа атомов, обменивающихся электроном с соседями. Точно так же, исследуя газ, состоящий из молекул аммиака C_3N, мы можем считать, что все эти молекулы находятся в абсолютно одинаковых состояниях, кроме, быть может, очень малого числа непосредственно сталкивающихся друг с другом в данный момент. Точно так же можно отождествлять формы сложных молекул, представляющих фон при изучении некой реакции, за исключением единичных случаев, и т. д. Такое отождествление позволяет экономить память компьютера, но оно не способно дать логарифмической сложности, к которой мы стремимся! Если на каждом уровне мы оставляем хотя бы двум однотипным частицам иметь различные состояния, нам не избежать расходов памяти как n^α, где n — число реальных частиц в моделируемой системе.

Для получения логарифмической сложности по памяти нам придется считать, что для основного числа уровней иерархии состояние частиц не играет роли вообще, а играет роль только их тип. Предельный случай состоит в том, что состояние вообще не играет роли, то есть мы можем считать, что все однотипные частицы находятся в одинаковом состоянии. Тогда вся разница между ними будет заключаться в пространственном расположении экземпляров составляющих их частиц нулевого уровня (в КЭД это электроны и ядра атомов и фотоны) в момент их непосредственной ассоциации (или излучения фотона). Поскольку исход такого столкновения определяется генератором случайного числа (если мы не принимаем какой-либо критерий типа d и D для ассоциации в молекулу — но этот критерий тоже, в конечном счете, требует генерации случайности, хотя и на более низком уровне иерархии), все разнообразие, которое мы тогда допускаем в систему состоит из

а) различные типы частиц,

б) различные пространственные положения,

в) возможность индивидуальности элементарных частиц.

Этот тип моделей основан на формировании новых частиц с помощью квантовых связей между экземплярами уже имеющихся частиц.

Мы пользуемся здесь эвристикой коллективного поведения в следующем строгом смысле. Любая регулярность в положениях частиц низкого уровня оформляется в виде формирования или распада частиц более высокого уровня, тогда как все положения, являющиеся не регулярными, трактуются как абсолютно случайные и для их представления используются не прямые обращения к этому низкому уровню, а генераторы случайных чисел. Именно этот прием отделения регулярности от случайности обеспечивает нам логарифмический рост сложности модели, поскольку прямое обращение к нерегулярным частицам низкого уровня потребовало бы их явного хранения в памяти. Таким образом, самым опасным типом разнообразия для таких моделей, исключающим использование логарифмической памяти, является пункт б).

Мы можем предположить, что все пространственные положения являются просто хаотическими, то есть наличие в них случайного порядка (например, случайно возникшей периодичности) не влияет на ответ. Этот тезис можно проверить случайным изменением начальных условий задачи — все сценарии должны сохраниться. Например, сборка молекулы нуклеиновой кислоты не зависит от точного начального положения ее будущих нуклеотидов — они находятся в хаотическом состоянии. Именно хаотическое движение и обеспечивает сборку этого полимера, то есть здесь порядок возникает из хаоса. Если это общая закономерность (есть основания полагать, что это так), то у нас остается два источника разнообразия сценариев: а) и в). Разнообразие типов частиц, по-видимому, вполне предсказуемо, то есть мы можем выделить их явно для каждого уровня (здесь есть еще темное место, связанное с динамикой, — например, некоторые ионы могут быть нестабильными в растворе или стабильность может зависеть от частоты падающих на них фотонов, и т. д.). Даже если это не так, мы можем спуститься на уровень ниже и рассматривать «сомнительные» частицы как ансамбли из частиц более низкого уровня. В этом случае все разнообразие сводится к разнообразию индивидуальности частиц нулевого уровня.

Мы можем получить логарифмическую по памяти модель только в том случае, если нам удастся свести все разнообразие сценариев к проявлению разнообразия элементарных частиц нулевого уровня, то есть истинно элементарных частиц согласно нашим представлениям. Только такие модели будут самыми эффективными. Но их использование будет и самым риско-

ванным, поскольку оно основано на предположениях о возможности игнорирования разнообразий а) и б). Когда целесообразно стремиться к построению таких моделей? Это оправдано, только если предмет исследований намного превосходит используемую вычислительную систему. Например, если речь идет о моделировании звезды.

Модели логарифмической памяти сходны с моделями динамики сплошных сред, которые описываются системой дифференциальных уравнений, не зависимо от наличия не устойчивых решений. Неустойчивость решения по начальным условиям является признаком подхода к предельному уровню иерархии для такого условия. Это означает, что форма решения определяется не начальным условием как таковым, а низшими этажами иерархии, то есть сценарием для составных частей частиц (как для тяжелого камня, стоящего на одной точке, траектория определяется не уравнением динамики для этого камня, а молекулярным процессом в точке опоры). Нахождение таких точек уже представляет огромную ценность, например, в авиастроении, где они определяют границы допустимых углов поворота рулей. Еще более интересная тема — управление системой в такой точке, что требует согласования разных уровней иерархии.[4]

Разумеется, модель не будет работать, если под типом частицы мы понимаем только ее состав, например, если элементами являются электроны и ядра, которые различаются только по их весу и заряду. Мы должны различать, например, в каком состоянии, $1s$ или $2p$, находится электрон в атоме водорода, и т. п., то есть надо обьявлять такие состояния разными типами частиц. Это хорошо для стационарных состояний, но не подходит для динамики: например, для переноса электрона уже надо будет различать много возбужденных состояний, особенно если нам нужны стадии этого процесса, от которых может зависеть общий сценарий, и т. д. Значит, необходим другой язык, в котором в типе частицы уже содержалась бы информация о возможных динамических сценариях с ее участием. Именно такой язык предоставляет метод коллективного поведения, при котором система частиц представляется в виде сети их экземпляров, связанных связями и нитями. В терминах сети мы можем хранить информацию об ограниченном числе пространственных конфигураций фрагментов сети (например, ее связных кусков), называя каждую такую конфигурацию отдельной частицей.

Резюмируем основные положения о ПКЕ. Он должен быть иерархической структурой, в которой на каждом этаже расположены системы частиц одного типа сложности, которые рассматриваются нами как элементарные составные единицы для элемента, стоящего непосредственно над ними на

[4]Это немного напоминает задачу, которую решает мошенник в азартной игре: использование более тонких механизмов для генерации нужного исхода.

следующем этаже. Частицей уровня j называется множество частиц уровня $j-1$, называемых ее компонентами, с указанием для каждой ее точных координат в системе центра масс, который считается координатой данной частицы уровня j. Такая частица формируется в сценарии с помощью квантовых связей между экземплярами ее компонент.

В соответствии с этим любая частица α нулевого уровня, входящая в рассматриваемую систему, будет иметь координату $\bar{E}(\alpha)$. При этом мы потребуем, чтобы существовал только заранее определенный и фиксированный набор $\bar{j}$ чисел $j_1, j_2, \ldots, j_l$, такой, что для любого уровня j, не входящего в $\bar{j}$, можно хранить в памяти ровно одну частицу уровня j и считать, что все другие частицы уровня j определены произвольно, причем от их определения не зависит динамический сценарий. Условимся также считать, что и для уровней, входящих в $\bar{j}$, число разных частиц ограничено некоторой абсолютной константой. Тогда модели будут иметь логарифмическую сложность по памяти в зависимости от объема всех частиц.

Все системы, описываемые дифференциальными уравнениями (как сплошные среды) являются моделями с логарифмической памятью. Это вытекает из того, что память компьютера расходуется не на хранение каждой частицы в отдельности, но на хранение общего числа частиц. ПКЕ есть обобщение такого рода моделей на сложные системы. Здесь мы пытаемся достичь того же эффекта правдивых сценариев, как и для дифференциальных уравнений, но для тех случаев, когда уравнения не применимы. Эти случаи связаны с образованием и распадом запутанных квантовых состояний, то есть с превращениями типа химических.

7.4. Зачем нужен ПКЕ

ПКЕ предназначен для объединения методов естественных наук и получения в результате этого объединения совершенно новых возможностей развития. Можно ожидать серьезного эффекта в результате последовательного применения известной части квантовой механики (КЭД и запутанных состояний на нескольких частицах) к объектам, изучаемым в химии и биологии; эта возможность используется достаточно широко, в особенности, с применением современного программирования. Но есть и другая возможность: совершенствование многочастичной эвристики для самой квантовой теории в многочастичной области, с помощью аналогий из химии и биологии. Мы уже обсуждали ограниченность квантовой эвристики в области многочастичных систем и то обстоятельство, что за фасадом стандартного формализма гильбертовых пространств могут скрываться неизвестные феномены. Подобные феномены могут иметь форму коллективных эффек-

тов фундаментальной природы, на которые мы можем надеяться натолкнуться при построении ПКЕ. Это обстоятельство требует от нас иного отношения к компьютерному моделированию, которое будет иметь гораздо более высокий статус, чем это есть сейчас, когда оно играет роль сервисной технической службы по уточнению деталей существующих приборов.

Если традиционное понимание слова «фундаментальный» сводилось к «наиболее мелкий из элементов мироздания», то теперь понятие фундаментальности будет шире. Поведение целой системы не сводится к поведению ее составных частей — истина, давно известная биологам, была по-новому осмыслена в квантовой теории с открытием явления запутанности состояний. Мы верим, что развитие ПКЕ поможет нам открыть новые глубины в области коллективных эффектов.

ПКЕ — особая программа. Ее настройка требует согласования модулей, отвечающих за различные уровни разбиения исходной сложной системы D_v

$$D_0, D_1, D_2, \ldots, D_v, \tag{7.1}$$

так что системы каждого следующего уровня D_{j+1} получаются объединением некоторых систем уровня D_j. Мы можем считать, что процесс сборки систем, в соответствии с упорядочением (7.1), является моделью физического процесса образования рассматриваемой системы. Временно предположим, что мы игнорируем существование запутанных квантовых состояний. Если мы установим, в соответствии с традициями, точные параметры процессов, определяющих эволюцию систем уровня D_0, то, поскольку запутанности у нас временно нет, мы получим точные параметры для D_1 и всех других уровней, вплоть до D_v. Все дело тогда сведется к определению начальных состояний для всех участвующих в системах уровня D_0 элементарных частиц. Если мы хотим сделать этот выбор для того, чтобы получить известное из эксперимента поведение системы D_v, нам надо будет перебрать все возможные начальные условия для всех элементарных частиц, входящих в системы уровня D_0, что практически невозможно сделать, если таких частиц больше 3. Из этого следует, что уточнение начальных условий для элементарных частиц низшего уровня надо делать, принимая во внимание происходящее на уровнях, отстоящих примерно на 3 единицы. Это справедливо для процессов, которые описываются устойчивыми решениями дифференциальных уравнений, то есть тех процессов, которые мы назвали простыми.

Для сложных процессов нам необходимо явно работать с иерархией систем (7.1), так как здесь будут играть роль запутанные квантовые состо-

яния. Например, при описании среды с фазовыми переходами или химическими реакциями мы должны учитывать формирование и распад частиц более высокого уровня, которые состоят из исходных. Для фазового перехода в твердое состояние такие «частицы» имеют форму трехмерных ансамблей, расположенных в узлах кристаллической решетки, для перехода от газообразного состояния в жидкое они могут иметь форму одномерных структур атомов, для аморфных или промежуточных типов могут появляться двумерные структуры.

В общем случае мы можем ввести понятие размерности, исходя из числа n_{nei} ближайших соседей каждого атома. Тогда размерность определяется как $\dim = n_{nei}/2$. Число ближайших соседей определяется числом указателей на них, то есть количеством связей у одного экземпляра данного атома. Таким образом, новые «частицы» могут иметь дробную размерность, то есть иметь тип фракталов. Такие «частицы» могут существовать достаточно долго (например, в кристалле) и при этом демонстрировать квантовое поведение, как настоящая частица. Мы уже встречались с подобной ситуацией. Но их время жизни может быть и очень малым, как, например, для жидкости. Тем не менее, именно эти короткоживущие «частицы» ответственны за такие явления, как турбулентность, изменение тепло- и электропроводности при фазовых переходах и т. п. Роль таких «частиц» в том, что модели этих явлений надо строить на их основе.

При образовании такой «частицы» ее компоненты, в некотором смысле, оказываются скрытыми: связи между их экземплярами однозначно определяются связями между экземплярами данной «частицы», ее структурность влияет на модель только в форме более сложной динамики элементов ее роя. Например, экземпляры молекулы водорода, как и атомы, могут испытывать вращения, что означает квантование вращательных степеней свободы электронов относительно ядра (волновые функции системы электронов), а также самих электронов и ядра (их спины). Этой возможности у нас не было при рассмотрении многочастичного роя, поскольку там мы не группировали исходные атомы в новые «частицы». Но в ПКЕ такой прием будет неизбежным. На уровне отдельных атомов это означает, что мы устанавливаем зерно пространственного разрешения для кортежей меньше, чем для их компонентов, то есть модифицируем диффузионную модель для более экономичного расходования вычислительного ресурса. Более того, для молекулы водорода у нас будет еще одна степень свободы, связанная с изменением расстояния между атомами. Для молекулы воды к перечисленным степеням прибавится еще и угол между направлениями на атомы водорода. Для молекулы, состоящей из 4 атомов, прибавится еще угол между плоскостями, образованными тройками атомов.

В общем случае динамика экземпляров структурных частиц должна иметь чувствительность к изменению состояний ее компонентов. Например, если мы рассматриваем задачу ассоциации атомов в молекулу, то динамика роя, соответствующего этой молекуле, должна изменяться, если мы изменяем начальные состояния реагентов; при этом динамика самих реагентов полностью скрывается сразу же после их ассоциации. Здесь нельзя дать более точных общих рецептов.

У отдельных атомов в системе структурных частиц, таким образом, вообще не будет самостоятельных состояний, а состояния будут только у этих сложных частиц. При этом если такие ансамбли не входят ни в какие отдельные системы уровней, меньших D_v, установление начальных состояний для элементарных частиц низшего уровня вообще не будет иметь никакой роли, так как этих состояний просто не будет. Фактически, характеристики таких частиц будут определяться тем, что происходит на высших уровнях, вплоть до D_v. Такое рассмотрение означает неизбежное использование многочастичного гильбертова формализма, что в конструктивной физике неизбежно приводит к возможности введения индивидуальности элементарных частиц в зависимости от того, в каких запутанных состояниях они участвуют. Если мы хотим от структурных частиц перейти к их компонентам, мы должны считать, что эти компоненты обладают индивидуальностью. Например, атом кислорода в молекуле воды отличается от атома кислорода в молекуле кислорода, и т. п., несмотря на то, что эти атомы принадлежат одному типу. Это соответствует реальной физике, так как если мы диссоциируем молекулы, то атомы одного типа, но происходящие из разных молекул, будут иметь различные квантовые состояния (состояния электронов (включая их спины), ядер, виртуальных фотонов и т. п.)

Не существует никаких параметров, кроме введения индивидуальности элементарных частиц, которые можно было бы использовать для согласования разных уровней. Если рассматривать элементарные частицы как совершенно одинаковые простейшие «кирпичики», из которых можно построить адекватную модель системы любой сложности, нам неизбежно придется прибегнуть к прямому перебору всех возможных начальных квантовых состояний рассматриваемой системы, что нельзя рассматривать как реальный путь. Иными словами, общепринятый путь рассмотрения эволюций по методу Коши (уравнение плюс начальное условие) является для сложных систем нереальным. Мы можем рассчитывать на успех только в случае рассмотрения сценариев по методу генетического отбора. Крайний случай такого отбора состоит в том, чтобы считать все рассматриваемые частицы, в том числе и элементарные, носителями генетической информации. Такая информация должна соответствовать состоянию всей системы,

а не только состоянию данной частицы. Это означает, что в каждой элементарной частице должна быть та или иная информация о ее месте в общей системе.

7.5. Учет случайного фактора в ПКЕ

При любой конкретизации эвристики коллективного поведения (метода динамической диффузии и т. д.) у нас есть случайный параметр, определяющий поведение каждого экземпляра из наших кортежей в любой момент административного времени. Этот случайный параметр, в конечном счете, влияет на результат отбора, то есть определяет результирующий сценарий, полученный применением нашей модели. Поскольку мы условились, что все рассматриваемые нами модели требуют не более чем линейного (а для сложных систем — не более чем логарифмического) времени в зависимости от размера системы, мы можем производить статистические эксперименты с этими моделями. В частности, мы можем повторять моделирование несколько раз, используя различные датчики случайных чисел. В результате такой работы мы сможем понять, насколько велика зависимость результирующего сценария, выдаваемого моделью, от датчика случайных чисел. Задача при этом заключается в том, чтобы добиться минимальной возможной зависимости результата моделирования от генератора случайности.

Минимизация случайного фактора соответствует общепринятой логике, согласно которой идеальная модель должна быть детерминистична. Но в стандартной квантовой теории случайность является встроенным фактором, имеющим абсолютный смысл. И мы вынуждены вводить в основу ПКЕ случайный фактор ради сохранения единства естествознания. Детерминистичность в квантовой теории трактуется как детерминистичность уравнений Шредингера или Дирака, включающих в себя волновые функции рассматриваемых систем. Эти функции являются результатом статистической обработки множества однотипных экспериментов, но если мы используем волновые функции как актуальные объекты, наша модель будет детерминистична в том смысле, что случайный фактор устраняется из нее полностью.

Это надо трактовать следующим образом. Если мы интересуемся не тем, что произойдет в данном конкретном эксперименте, а тем, что получится в результате усреднения по огромному количеству однотипных экспериментов, проведенных с различными и не зависимыми друг от друга датчиками случайностей, то наша модель будет давать совершенно определенный результат. Именно в этом смысле случайный фактор полностью

устраняется из моделей простых систем. То же самое справедливо и для таких процессов, как стандартные реакции рассеяния двух заряженных частиц со спином или простые химические процессы, подобные разобранному в предыдущем параграфе процессу ассоциации двух протонов в молекулу водорода. Для всех процессов такого рода есть смысл говорить об усреднении по большому числу повторов эксперимента, и случайный фактор должен устраняться.

В сущности, устранение случайного фактора из моделей простых процессов представляет собой иную форму общеизвестного запрета на существование скрытых параметров в квантовой теории, который активно обсуждался еще в 60-х годах двадцатого века Беллом, Бомом и другими и которому мы дали выше конструктивную трактовку. Можно сказать, что этот запрет представляет собой уверенность в том, что волновой функции достаточно для описания свойств любой достаточно простой системы. Запрет существования скрытых параметров представляет собой, таким образом, один из краеугольных камней стандартной квантовой физики и должен безоговорочно приниматься в пакете с самой квантовой теорией в пределах ее сферы применимости, то есть для простых систем.

Мы уже обсуждали, что квантовые эффекты проявляются при величине действия $\Delta S = \int\limits_{t_0}^{t_1} L(x_t, x, t)dt$, сравнимой с постоянной Планка h, что подразумевает малые промежутки времени. Это, разумеется, не мешает применить квантовую механику и при больших временах, только в этом случае она даст траекторию, близкую к классической. Однако при построении модели динамики систем с большим числом частиц нельзя брать очень малые промежутки времени по следующей причине. Квантовая механика оперирует с волновой функцией, которая является объектом статистической природы. Поэтому ее применение даст верный результат только для большого числа однотипных сценариев.[5] С ростом числа частиц в рассматриваемой системе это большое число сценариев для набора статистики будет расти как экспонента от числа частиц. Однако смысл построения моделей только в том, что это дело заканчивается в обозримое время. Потому в сложных случаях мы вынуждены оперировать совсем не с достоверной статистической выборкой, а, фактически, с единичными событиями, которые и дают наблюдаемый динамический сценарий для сложной системы. То есть роль случайного фактора, который успешно фильтруется для простых

[5]Измерение спектров не является исключением, так как так же требует статистической выборки.

сценариев (например, для рассеяния одной частицы на другой) в сложных системах драматически возрастает.[6]

Мы видим, что у стандартной квантовой механики есть очень серьезное ограничение по времени: **рассматриваемый промежуток времени должен быть достаточен для проявления статистического характера всех элементарных процессов в сложной системе, и это, с учетом запутанных состояний, делает прямое применение стандартной квантовой теории к сложным системам невозможным.**

Следует ли отсюда, что роль квантовых эвристик для построения моделей химии и биологии будет уменьшаться при усложнении рассматриваемых систем? Разумеется, нет. Более того, я глубоко убежден, что подобная **практика построения моделей, не основанных по своей сути на квантовой теории, является в корне ошибочной** и не способной дать систематического продвижения, даже несмотря на отдельные интересные находки.

Самым ценным в квантовой теории (наряду с принципом суперпозиции) является многочастичный гильбертов формализм тензорных пространств, описывающий состояния многочастичных систем. Именно конструктивное урезание этого формализма, которое обсуждалось нами выше, то есть явное рассмотрение связей, и дает ключ к построению ПКЕ. В связях, формирующих кортежи экземпляров для модели сценариев, кроется фундаментальная физическая сущность, которую мы в настоящий момент просто не осознаем в должной мере, поскольку ее проявления становятся существенными только на уровне сложных систем.

Случайный фактор является встроенным в стандартную квантовую теорию в силу статистической природы самой волновой функции Ψ, при которой квадрат ее модуля трактуется как плотность вероятности обнаружения частицы в данной точке конфигурационного пространства. Конструктивизация динамики одной частицы придает случайному фактору форму так называемых преквантовых полей, если под преквантовыми полями понимать причину, заставляющую частицу вести себя как рой. Такая конструктивизация дает не много, поскольку природа случайности остается от нас скрытой. В действительности, истинная природа этой случайности может быть настолько глубокой, что у нас нет шансов понять ее вполне, но это и не требуется. Если мы наблюдаем за фотодетектором и ждем щелчка от попавшего в него фотона, в повседневной жизни роль играет плотность та-

[6] Это хорошо известно в технике. Для точно изготавливаемого прибора точность обработки его деталей высока, и нарушение его функциональности детектируется как неисправность конкретной детали, в то время как для прибора, основанного на подгонке индивидуальных деталей, поломка имеет гораздо более сложную причину.

ких щелчков, а не конкретный момент их наступления. Если же критически важен именно момент щелчка (так может быть, например, в нашем организме), то в процесс оказываются существенно вовлеченной вся система эмиссии и детектирования данного фотона и задача приобретает совершенно иной смысл по сравнению с ожиданием у фотодетектора.

Если мы обратимся к понятию зерна амплитуды и применим метод коллективного поведения, то продвинемся немного дальше по пути понимания случайного фактора в квантовой механике: он оказывается связанным с образованием длинных кортежей экземпляров участвующих частиц. Судьба сложного кортежа может зависеть от поведения одного его конкретного члена, то есть (потенциально!) от индивидуальности конкретного экземпляра. Анализировать это с помощью стандартной квантовой теории невозможно: плотность вероятности $|\Psi(r_1, r_2, \ldots, r_n)|^2$ экспоненциально мала, то есть, с точки зрения конструктивизма, так мала, что просто не существует: для такого коллектива действует иной алгоритм! Здесь проходит абсолютная граница применимости стандартной квантовой теории: эта граница лежит в области систем частиц, число которых больше примерно 5 (для большего числа частиц прямой метод волновых функций не будет применим даже на суперкомпьютерах). Но из квантового компьютинга мы знаем, что малость чисел не является препятствием для наличия наблюдаемых эффектов — и это является хорошим напутствием для развития ПКЕ от традиционной квантовой механики.

7.6. Индивидуальность элементарных частиц и ПКЕ

Возникает естественный вопрос: можно ли на имеющемся экспериментальном оборудовании обнаружить эффекты, хотя бы косвенно подтверждающие плодотворность того пути, который мы назвали конструктивизмом в физике и который приводит к идее ПКЕ?[7] Одна из таких возможностей — обнаружение индивидуальности элементарных частиц. Для этого необходимо проведение серии повторяющихся экспериментов над одной и той же элементарной частицей, например, над одним и тем же протоном, электроном или атомом. В стандартной квантовой теории у элементарных частиц нет никакой индивидуальности, и потому нет никакой разницы, производим мы опыты над одним атомом или над разными. Возможности эксперимента над индивидуальными квантовыми объектами (например, обращение

[7]Отрицательные результаты, вроде абсолютной модели декогерентности, не относятся к их числу. Равным образом речь не идет о построении эффективных компьютерных моделей. Мы имеем в виду именно новые эффекты, которые (предположительно?) могли бы дополнительно поддержать идею ПКЕ в среде физиков. Мы сформулируем такие проблемы в заключении.

к одному конкретному атому) появились сравнительно недавно, с созданием туннельных микроскопов. Можно сравнить статистики, собранные для различных индивидуальных атомов, в попытке обнаружить нечто, могущее быть охарактеризованным как индивидуальная память.[8] Введение индивидуальностей для элементарных частиц может оказаться продуктивным для построения компьютерных моделей, но можно попытаться обнаружить такую индивидуальность непосредственно, поскольку современные приборы позволяют сделать это.

Надо иметь в виду, что проявление такой индивидуальности может быть очень редким, и здесь с очевидностью возникает проблема надежности статистических выводов. Редкие отклонения от характерных статистик, которые наверняка можно обнаружить, вполне могут укладываться в предположение о идентичности атомов, если применить к таким статистикам, например, критерий Пирсона Ξ^2. Поэтому более продуктивным путем может быть проведение серии экспериментов над чуть более сложными системами, например, молекулами, с построением модели типа коллективного поведения, которая бы объяснила результаты с использованием индивидуальности атомов.

7.6.1. Критерий согласия Пирсона

Дадим короткое напоминание о главном методе статистической обработки результатов многократных экспериментов — о критерии согласия Пирсона. Этот критерий называют еще критерием Ξ^2.

Действительно, метод коллективного поведения включает в себя не просто возможности индивидуальности элементарных частиц, а возмож-

[8] Эта память представляет собой как раз те скрытые параметры, доступ к которым копенгагенская теория запрещает. Для отдельных частиц этот запрет имеет совершенно определенную форму, вытекающую из соотношения неопределенности «координата–импульс». Если мы хотим узнать какие-либо индивидуальные характеристики электрона, например, точно узнать его положение или экспериментально проверить гипотезу о наличии каких-то его составных частей (что является попыткой приблизиться к границе Ω), он получает импульс, величина которого исключает повторение этого эксперимента над данным электроном: для следующего подобного эксперимента нам придется взять уже другой электрон. Если же мы зафиксируем электрон некоторой связью, скажем, внутри атома, который, в свою очередь, находится внутри кристаллической решетки (для точности локализации), то это, конечно, может неограниченно снизить зерно разрешимости по пространству для серии последовательных экспериментов, так как электрон никуда не улетит. Но тогда мы не сможем отличить индивидуальность данного электрона от индивидуальности множества других частиц, экземпляры которых связаны с электронными в одни кортежи. Копенгагенская механика составляет, таким образом, свод правил для пользователя модели, одним из которых и является «запрет на знание скрытых параметров». Как мы видели, в конструктивизме этот «запрет» просто вытекает из теоремы теории алгоритмов.

ность индивидуальности их экземпляров. Случайная величина Ξ^2 определяется как сумма n квадратов независимых стандартных нормальных величин, деленная на n, где $r = n - 1$ считается числом степеней свободы:

$$\Xi^2 = \frac{\xi_1^2 + \xi_2^2 + \ldots + \xi_n^2}{n}.$$

Распределение этой величины хорошо известно.

Пусть у нас есть выборка $\bar{x}$ из значений некоторой случайной величины η_0. Мы хотим определить, совпадает ли величина η_0 со случайной величиной η с известной плотностью распределения $p_\eta(x)$. Гипотеза о совпадении η_0 с η называется гипотезой согласия. Заметим, что о величине η_0 мы не знаем ничего, кроме выборки ее значений $\bar{x}$. Мы хотим выяснить, насколько эта выборка согласуется с известным распределением для эталонной величины η.

Критерий Пирсона дает возможность проверять гипотезу согласия. Для его применения надо проделать следующее. Сначала разбиваем возможную область значений x на r интервалов и нумеруем их буквой k. Затем для каждого из интервалов Δ_k вычисляем вероятность попадания значения величины η в данный интервал: $p_k = \int_{\Delta_k} p_\eta(x)dx$. Теперь разбиваем элементы выборки на группы, так что группа k состоит из элементов, попавших в интервал k, и пусть

$$\tilde{p}_k = \frac{g_k}{G}$$

есть относительное число элементов выборки, попавших в интервал k. Затем надо задаться уровнем значимости $\alpha > 0$ и найти по нему пороговое значение $t_{r,\alpha}$ для Ξ^2-распределения. Наконец, надо составить контрольную сумму

$$S_{\bar{x},\alpha,\bar{\Delta}} = \sum_{k=1}^{r} \frac{(p_k - \tilde{p}_k)^2}{np_kq_k}.$$

После этого сравним контрольную сумму S с уровнем $t_{r,\alpha}$. Если она окажется меньше уровня, гипотеза о согласии принимается, если больше — отвергается.

Как можно применить критерий Пирсона к нашей проблеме распознавания индивидуальности атомов? Допустим, мы исследуем вероятности нахождения атома в возбужденном состоянии в зависимости от длительности t лазерного импульса, поданного на этот атом. Такая зависимость выражается формулой вида $P = \frac{|\eta|^2}{2\omega^2}(1 - \cos\ 2\omega)$, где $\eta = F_{mn}/h$, F_{mn}

есть матричный элемент возбуждения, создаваемого лазером, ω — его частота (см. [58], стр. 176). Значение $F_{mn} = \int \Psi_m^*(r) F \Psi_n(r) dr$ фактически зависит от стационарных волновых функций, при точном вычислении которых надо применять электродинамическую реакцию рассеяния фотона на атоме. Правила электродинамики содержат перенормировки заряда и массы, которые, вообще говоря, зависят от среды, в которой атом находится, в частности, от состояния фотонов, которые мы точно не знаем. Если предположить, что разные атомы находятся в несколько различающихся условиях, то и перенормировки для них будут немного различаться, и это может служить источником того, что мы называем индивидуальностью атомов. Такого рода индивидуальность проявляется в том, что значения p для разных атомов будут немного отличаться, и это можно пытаться зафиксировать с помощью метода Пирсона, если проводить выборку результатов измерения вероятности (фактически — времени пребывания в возбужденном состоянии) для одного конкретного атома. В подавляющем большинстве экспериментов по квантовой физике за индивидуальностью выборки не следят, даже более того — эксперименты, как правило, предполагают совокупный отклик от огромных ансамблей атомов, что заведомо нивелирует индивидуальность. Возможность многократно обращаться непосредственно к одному и тому же атому появилась сравнительно недавно — с изобретением туннельных микроскопов. Было бы интересно использовать эту возможность для сбора индивидуальных статистик в том духе, как это описано выше.

Принципиальное возражение могло бы выглядеть так. Обсуждавшиеся нами перенормировки чрезвычайно малы, и потому находятся заведомо за пределами точности постановки исходного эксперимента о вероятности нахождения в возбужденном состоянии. Такое возражение верно только при условии, что мы игнорируем запутанность квантовых состояний. Однако такие состояния имеют место при одновременном рассмотрении электронов атома, его ядра и всех фотонов в качестве элементов единой системы элементарных частиц. Мы видели, что такого рода запутанные состояния возникают при фундаментальных взаимодействиях КЭД, то есть от них невозможно избавиться с помощью локальных приемов типа перенормировок или изменения базиса. Наличие запутанных состояний способно существенно изменить картину стандартных приближений. Это возможно в силу феномена квантового компьютера, который подробно описан в приложении. Суть феномена в том, что существуют условия, при которых очень малые амплитуды редких событий складываются конструктивно, порождая реально наблюдаемые исходы, которых бы не было, если бы не существование запутанных состояний.

Стандартные методы приближений, согласно которым мы отбрасываем диаграммы высших порядков, и тому подобные. общеизвестные приемы основаны именно на игнорировании запутанности. Идеология квантового компьютера говорит о том, что подобные КК-феномены редки, но совершенно достоверны. Если переводить это на язык реальных систем, мы должны заключить, что возможны редкие события, при которых картина стандартных приближений не срабатывает, и это можно зафиксировать в виде индивидуальности элементарных частиц или индивидуальности атомов. Разумеется, предложенный путь не гарантирует никакого определенного успеха. Статистические критерии для простых экспериментов не являются исчерпывающими.[9]

Есть еще один подход к проблеме индивидуальности, связанный с использованием времени. Можно исследовать процессы, предполагая, что есть накопление информации об истории отдельного атома. Такие эксперименты на молекулах [46] показывают наличие так называемой молекулярной памяти, то есть памяти о реакциях, в которых данная молекула принимала участие. Молекулярная память может быть связана с наличием долгоживущих квантовых состояний, например, состояний ядерных спинов, которые могут сохраняться часами.

7.6.2. Индивидуальность экземпляров частиц

Метод коллективного поведения имеет дело с экземплярами элементарных частиц, которые и можно рассматривать как носителей индивидуальности в том смысле, в котором, например, присутствующие в каждой клетке гены живого существа содержат информацию обо всей его индивидуальности. Наделение экземпляров элементарных частиц индивидуальными свойствами является, на мой взгляд, самым правильным шагом в методе коллективного поведения при его применении к сложным системам.[10]

Рассмотрим, как это могло бы выглядеть в ПКЕ. Для этого предположим, что каждый экземпляр одной и той же реальной частицы содержит информацию о виде динамического сценария ее эволюции во времени. Поскольку субъектом нашей модели, состоящей из сценариев, являются не экземпляры реальных частиц, а состоящие из них кортежи, надо считать, что информация о динамическом сценарии является атрибутом кортежа экзем-

[9]Мартышки могут выдать неплохое четверостишие при достаточно долгой работе с клавиатурой, если есть хоть какой-то контроль качества. Если индивидуальность атомов — действительно очень редкий феномен, мы можем оказаться в нелегком положении, пытаясь обнаружить его статистическими методами.

[10]Похожий прием фактически использовал де Бройль, представляя квантовую частицу как точку, расположенную на волне.

пляров. Каждый кортеж, таким образом, можно уподобить молекуле ДНК, несущей информацию о проекте всего организма. То есть кортеж в биологической терминологии является геномом. Каждый экземпляр в кортеже подобен конкретному гену, который отвечает за поведение соответствующей реальной частицы. Можно заиндексировать такое поведение, соответствующее гену a, через S_a. В S_a будут, таким образом, содержаться все параметры, полностью определяющие конкретные рассеяния, в которых принимает участие экземпляр a.

Динамический сценарий состоит из последовательных актов элементарных рассеяний, в каждом из которых участвует лишь малое число (2–3) реальных частиц. Таким образом, на каждом шаге сценария в содержательном взаимодействии принимает участие только несколько экземпляров одного и того же кортежа. Это же относится и к диффузионному механизму обмена импульсами, только здесь в элементарном шаге сценария участвуют экземпляры, входящие в разные, но пространственно близкие кортежи (имеется в виду, как всегда, близость в конфигурационном пространстве для нескольких частиц). Определить конкретный ген, ответственный за тот или иной поворот в сценарии эволюции, можно, только сравнивая эту эволюцию с другими возможностями, при процедуре отбора квантовых состояний. Такие экземпляры можно назвать критическими. На рисунке 7.1 схематически изображены критические экземпляры, присутствие которых в кортеже определяет соответствующий этому кортежу сценарий эволюции рассматриваемой системы.

Назначение критических экземпляров является, конечно, вопросом удобства моделирования и составляет предмет труда программиста, создающего инструмент моделирования (в зависимости от интерфейса ПКЕ, эта функция может быть возложена и на пользователя модели). Тем не менее, это назначение отнюдь не является чистым произволом; более того, назначение критических экземпляров есть, по-видимому, серьезный вопрос, который касается пригодности данной модели вообще. Например, если мы рассматриваем систему с почти классическим поведением, критическим будет экземпляр реальной квантовой частицы, который ведет себя так, как вела бы себя классическая частица.

Каждый ген-экземпляр представляет определенное поведение реальной частицы, и в условиях жесткой экономии классической памяти моделирующего компьютера любой ген будет представлять содержательный тип поведения, влияющий на весь сценарий. Иными словами, большинство генов должно быть критическими в тот или иной момент административного времени. Используя биологическую аналогию, мы можем предположить, что наиболее правильным способом задания сценария будет последователь-

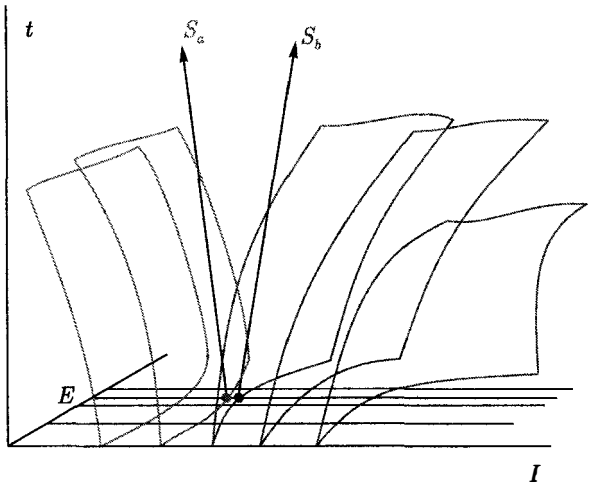


Рис. 7.1. Критические экземпляры модели

ность выбора конкретных генов, активных в последовательные моменты времени $t_0, t_1, \ldots$.

Процесс обмена экземплярами при отборе квантовых состояний соответствует биологическому процессу обмена генетическим материалом, необходимому при эволюции живых существ. Мы имеем здесь аналогию с биологическими процессами, которая отмечалась в множестве работ. ПКЕ должен позволить нам использовать подобную аналогию в практических целях — для совершенствования моделей процессов разных уровней, вплоть до уровня фундаментальных взаимодействий. Может оказаться, что именно такая широта охвата необходима для реалистичности модели биологических объектов. На следующем рисунке (рис. 7.2) представлена модель сложной эволюции, состоящая из многих элементарных актов рассеяний.

Приведем простой пример того, какого рода индивидуальность экземпляров частиц мы могли бы рассматривать. Пусть у нас имеется набор абстрактных атомов некоторых типов $A, B, C, \ldots$, и мы интересуемся возможностью их ассоциации в молекулу, имеющую форму цепочки

$$C_1 - C_2 - C_3 - \ldots - C_k - C_{k+1} - \ldots,$$

где тип каждого атома C_j заранее определен. В силу того, что атомы, скажем, типа A могут занимать различные положения в этой цепочке, так что их соседями окажутся атомы разных типов, мы можем, для определенности, рассмотреть ситуацию, при которой типы атомов будут распределены

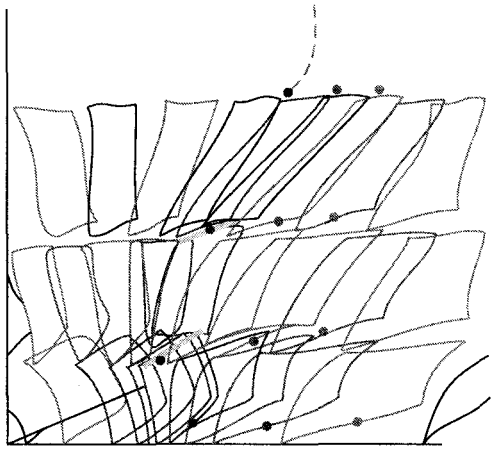


Рис. 7.2. Эволюция, заданная выбором критических генов: голубым цветом изображено изменение кортежа при селекции

так:

$$B - A - C - \ldots - D - A - E - \ldots . \tag{7.2}$$

Предположим, что равновесное положение атомов в данной цепочке, определенное ковалентными электронными связями между соседними атомами, таково, что дистанция $B - A$ равна r_{B-A}, а дистанция $D - A$ равна r_{D-A}. Можно также предположить, что если мы рассмотрим классический потенциал для первого и второго вхождения атомов типа A в (7.2), квадратичные потенциальные ямы будут отличаться не только по координате центра $r_{B-A} \neq r_{D-A}$, но и по крутизне. Будем игнорировать влияние правого соседа. Тогда при использовании метода отбора квантовых состояний мы будем вынуждены предполагать у двух атомов типа A разные свойства, поскольку они будут ассоциироваться с соседним атомом на различных расстояниях.

Мы можем еще усложнить наш пример, если вместо B и D рассматривать не атомы, а молекулы, имеющие сложную структуру. Тогда при отборе будет играть роль, в какой точке пространства находится экземпляр атома A при одной и той же позиции его соседа слева. Это означает, что разные экземпляры одного и того же атома типа A будут преимущественно ассоциировать в кортежи на разных расстояниях от соседа слева. То есть индивидуальности надо, в действительности, приписывать в первую очередь не реальным атомам, а их экземплярам. Индивидуальность реальных атомов проявляется только через индивидуальность их экземпляров. Эта ситуация полностью аналогична обыкновенной генетике, где (мы пре-

дельно упрощаем ситуацию!) наследуются гены, имеющие определенную автономию, а геном состоит из их набора.

Автономия экземпляров элементарных частиц очень удобна для роевого представления КЭД. Эмиссия экземпляра фотона определенным экземпляром заряженной частицы зависит от индивидуальности этого экземпляра. Можно, например, считать, что у каждого экземпляра заряженной частицы есть определенный запас виртуальных экземпляров фотонов, которые этот экземпляр может эмитировать до тех пор, пока запас не иссякнет; пополняется запас виртуальных фотонов при абсорбции экземпляра фотона. Понятие об индивидуальности экземпляров частиц может оказаться плодотворным именно в КЭД. Причина этого состоит в том, что КЭД не является законченной теорией. То обстоятельство, что нет универсального способа преодоления расходимости рядов для амплитуды, может говорить о плодотворности приписывания индивидуальности экземплярам заряженных частиц и фотонов. Эта индивидуальность, в частности, может определять перенормировку заряда и массы частицы, поскольку такие перенормировки зависят от окружения данной частицы.

Формальной стартовой точкой для определения индивидуальности экземпляров служит существование тонкого слоя в рое миров квантовой системы n реальных частиц. Принадлежность к тонкому слою определяет очень грубый тип индивидуальности миров. Более тонкую классификацию можно получить, разделяя такие миры по скоростям экземпляров отдельных частиц. Еще более тонкое различение дает запоминание целых динамических сценариев. Вопрос о целесообразности такой классификации может быть решен только на пути практической реализации ПКЕ.

Индивидуальность экземпляров открывает нам новые возможности использования ПКЕ, при которых будет допустимо считать, что наблюдаемые эволюции являются предпрограммированными. Эта ситуация таит серьезную опасность. Такое предположение при его неограниченном использовании делает ПКЕ полностью индивидуализированным, а это означает потерю объективности. К счастью, против такой опасности есть противоядие, и оно — в самой основе конструктивизма. Я имею в виду заложенную в нем идею плюрализма. Каждый пользователь волен наделять объекты ПКЕ любыми свойствами индивидуальности, которые допускаются его сигнатурой, в частности, индивидуальностью экземпляров элементарных частиц. Эта возможность принципиально важна для будущего развития всех естественных наук и, прежде всего, физики. Но мы должны помнить и о неизбежном отборе, который касается не только описанных нами сценариев квантовых эволюций, но и любых других сценариев, реализуемых с использованием ПКЕ. Поэтому не следует опасаться потери наукой ее объективности.

Гораздо важнее наличие в ПКЕ совершенно новых возможностей, по сравнению с имеющимися моделирующими программами. Эти возможности стоят того, чтобы заняться проектом ПКЕ, не взирая на большую неопределенность.

7.6.3. Параллельные алгоритмы квантового моделирования

Вопрос о возможности распараллеливания алгоритма состоит в том, можно ли уменьшить время вычислений, увеличив число вовлеченных в него отдельных процессоров. Иными словами, можно ли приобрести преимущество во времени, заплатив пространством (памятью)? Важность этого вопроса выходит за пределы традиционных границ естествознания, потому что он возникает даже при управлении большими группами людей и имеет как экономическое, так и политическое измерения. Поскольку эффективность в самом общем виде выражается как экономия времени, можно сказать, что вопрос об эффективности любого процесса (например, промышленного производства или образования) есть вопрос о его распараллеливании. Из опыта известно, что распараллеливание далеко не всегда возможно.

Чем сложнее рассматриваемая система, тем менее вероятно успешное применение распараллеливания в моделировании ее поведения. Труднее всего рассчитывать на успех в распараллеливании при моделировании такого явления, как жизнь, то есть поведения и развития живого существа. Препятствие на этом пути, которое обычно имеет философские трактовки, в действительности, понятно; его источник в том, что все мы принадлежим к таким объектам. Потенциальное наличие логически порочной обратной связи проявляется в том, что цель наших усилий по алгоритмизации изучаемых процессов в любом случае начинает от них же и зависеть. Это, однако, не должно нас останавливать в развитии методов распараллеливания, и квантовая механика дает нам естественные пути для этого.

Классический подход к распараллеливанию основан на том, что за каждым отдельным процессором закрепляется определенная часть рассматриваемой системы, так что для процессоров появляется возможность обрабатывать информацию по разным частям одновременно, периодически обмениваясь информацией друг с другом. Этот простейший подход применим только к сравнительно простым системам, которые мы считаем классическими и в случае которых можно говорить о состояниях их отдельных частей. Наличие запутанности лишает смысла понятие «состояние части системы», потому что если это понятие ввести для данного типа распараллеливания, мы обнаружим, что состояние всей системы не сводится к набору «состояний его частей».

Однако запутанные состояния квантовых систем дают нам и новые возможности для распараллеливания, которых не было в классическом формализме. Квантовый параллелизм используется в теории квантовых вычислений. Этот вид квантового параллелизма вытекает из возможности для квантовой частицы находиться во многих классических состояниях одновременно. Реальный путь использования такого параллелизма состоит в том, чтобы применять запутанные состояния в распределенных вычислениях, имеющих практическую ценность. Но квантовый параллелизм содержит и более глубокую идею. Конфигурационное пространство для квантовых состояний может содержать физическое время, из чего вытекает существование запутанных состояний с различными временами для разных реальных частиц. Такая ситуация немыслима в классическом формализме, где время отделено от пространства. Но именно включение таких состояний означает, что квантовые миры могут обладать различными временами, а следовательно, их в этом случае целесообразно представлять в модели разными процессорами.

Таким образом, для квантового моделирования мы имеем, наряду с обычным путем распараллеливания, другой, чисто квантовый метод. Он состоит в том, что разные процессоры моделируют разные квантовые миры или разные группы таких миров. При этом любой процессор содержит информацию обо всех реальных частицах, но только представленных своими экземплярами, соответствующими данному миру. Именно это дает мирам некоторую автономию, в частности, их моделирование может не быть полностью «синхронным» — они могут иметь разные времена. Взаимодействие таких миров происходит в рамках обработки «взрывов пиков» и селекции квантовых состояний. Этот вид параллелизма, по мирам, может сосуществовать с обычным методом распараллеливания — по конфигурационному пространству.

Распараллеливание «по мирам» удобно тем, что в его рамках можно применять для разных процессоров разные программы моделирования динамики, с единственным условием возможности сравнения — для детектирования моментов административного времени, в которые надо следить за возможным образованием «пиков» или производить селекцию состояний. В рамках этого типа распараллеливания можно рассматривать запутанные состояния с разными наборами частиц, возникающие при эволюции системы (например, возбужденый атом и излученный фотон вместе с атомом в основном состоянии, а также и многие более сложные случаи с участием многоатомных молекул). Наконец, распараллеливание «по мирам» позволяет выбирать для каждого мира или группы миров отдельные значения зерна пространственного и временного разрешения. Такая возможность

очень важна для моделирования в химии. Например, суперпозиция состояния двух атомов на близком расстоянии и двух атомов и электрона, переходящего от одного атома к другому, требует разных шагов по пространству и времени, так как для правильного описания перехода электрона нужно иметь гораздо меньший шаг, чем для описания перемещений атомов. В то же время запутанность таких состояний необходимо прослеживать, потому что интерференция на последующих шагах может создать новые эффекты.

7.7. Заключение

Мы познакомились с рядом идей, объединенных под общим названием конструктивной физики. Эти идеи не составляют отдельной дисциплины, точно так же, как и конструктивная математика не является какой-то отдельной наукой. Конструктивизм — это направление, которое появилось в математике, а точнее, в ее основаниях, и в своем развитии переходит на физику. Этот процесс неизбежен и благотворен. Я буду рад, если эта книга поможет читателю составить более определенное отношение к конструктивизму и, тем более, если вызовет желание заняться развитием этого направления непосредственно. Позволю себе перечислить те задачи, решение которых представляется мне вполне доступным в рамках конструктивной физики уже сейчас.

Первая задача — создание для квантовой электродинамики эффективной эвристики, которая не опиралась бы на некорректные приемы типа асимптотических рядов и давала бы при применении к столкновению атомов простой критерий образования химической связи и ее разрыва. Хорошей стартовой точкой может служить эвристика коллективного поведения, описанная нами для стандартной квантовой механики. Решение этой задачи необходимо для создания полноценных симуляторов химии.

Второй задачей является создание конструктивной теории сверхпроводимости на основе эвристики коллективного поведения, которая обладала бы предсказательной силой. Для этого надо заново рассмотреть теории, созданные в этой области, включая высокотемпературную сверхпроводимость. Здесь можно ожидать большого прогресса, и новый аппарат конструктивной квантовой теории должен помочь его достигнуть.

Третью задачу можно условно назвать конструктивным описанием алгоритма Гровера для многочастичных систем. Это описание должно включать в себя процесс рассеивания роя системы в тонкий слой и обратный процесс конденсации тонкого слоя в рой на ограниченной области пространства (в пределе — в одной точке). Если первый процесс является обыкновенным расплыванием сжатого квантового состояния в соот-

ветствии с уравнением Шредингера, то обратный процесс совершенно не тривиален. Физическая реализация второго процесса есть метод трансформации кинетической энергии экземпляров системы во внутреннюю энергию роя; такие процессы могли бы стать основой для особых энергетических устройств, эффективность которых основана на фундаментальных свойствах квантовых систем.

Четвертая задача — создание прообраза ПКЕ для описания системы большого числа (например, 10^{12}) атомов нескольких типов с полной масштабируемостью. В рамках такой модели наращивание числа атомов должно привести к эволюциям, соответствующим решениям уравнения типа Навье–Стокса.

И наконец, я подчеркну еще раз важность новой для физики особенности конструктивного математического аппарата — существование плюрализма логических оценок. Идя по пути конструктивизации физики, мы должны будем привыкнуть к такому плюрализму. Он заложен в самой природе конструктивной математической логики, и его нельзя будет избежать. Множественность будет иметь разнообразные проявления, не относящиеся напрямую к логическим аспектам. Например, хорошо известно, что эта особенность возникает везде, где применяются алгоритмы и программирование, вплоть до различных программных реализаций одной и той же конструктивной эвристики. В мире классической математики, где главный инструмент — формулы, такой множественности нет.

Переход к конструктивному математическому формализму представляется единственным разумным выходом из кризиса, в котором оказались не только физико-математические дисциплины, но и мышление в целом. Неспособность классической картезианской математики играть организующую роль в познании природы становится вопиющей и оказывает тормозящее действие как на теоретическую физику, так и на более далекие области — химию и биологию. Естествознание становится все более и более разобщенным и фрагментарным, что не сулит нам ничего хорошего.[11] Междисциплинарный подход, трактуемый как взаимное изучение специалистами разных наук достижений друг друга, вряд ли способен сильно изменить эту ситуацию, поскольку добавление новых связей в и без того перегруженную систему знаний способно, скорее, умножить хаос. Проблема заключается в совершенно конкретном звене этой системы — в математике, а именно — в ее картезианском характере, который нужно заменить конструктивизмом, во всяком случае, в той ее части, которая взаимодействует с физическими экспериментами и сама по себе определяет, какие

[11] Когда эта книга уже была написана, я встретил размышления на эту же тему в статье С. П. Новикова [?].

эксперименты вообще надо ставить. Это предполагает очень крутой поворот в наших представлениях о том, какой должна быть настоящая математика, для того чтобы снова играть свою традиционную организующую роль. Этот поворот не вполне воспринимается математическим сообществом,[12] что и показала уже история, и вряд ли мы должны сожалеть о том, что это именно так, потому что процесс развивается во времени и здесь будет играть особую роль личностный фактор, а к математическому сообществу это относится непосредственно. Важно то, что для подъема на новую вершину в познании, где математика будет применяться к сложным системам, мы неизбежно должны спуститься с вершины, которую мы уже достигли с помощью картезианской математики, и здесь неизбежно утрачивают силу традиционные критерии и разграничения компетенций. Я считаю это хорошим знаком, потому что здесь возможно вовлечение в активную работу многих новых талантливых людей, в частности, близких к компьютерам. Перед нами открывается практически неизвестный новый континент, где (правда, на пока большом удалении от нас) присутствуют живые объекты; их присутствие как раз и придает остроту и актуальность повороту к конструктивизму.

Мы никогда не покинули бы уютный и однозначный мир формул, если бы он позволял нам решать наши новые задачи, но факты говорят, что его эффективность уже почти исчерпана. Нам придется вступить в мир конструктивизма, на дорогу с множеством развилок, где придется явно обращаться к экспертизе, основанной на визуальных образах, и тому подобным вещам, которые традиция классической математики выводила за рамки физических теорий. Все это — неизбежная и минимальная плата за нужную нам эффективность. Вступая на этот путь, мы должны надеяться, что от размывания самого предмета нашей науки спасает законность, которой обладает в науке конструктивизм и которая завоевана нашими предшественниками. Эта законность дает нам ясное понимание того, что такое алгоритм и как именно человеческие оценки и произвол связаны с точным выполнением команд компьютером. Такое понимание законности еще никого не подводило, и у нас нет оснований сомневаться, что конструктивизм будет так же верно служить нам в физике, как служил в ней классический математический аппарат. Именно на этом пути мы сможем дойти до границы, отделяющей наш предмет от мира объектов, которые принято называть живыми.

[12] Границы этого сообщества, разумеется, очень расплывчаты.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Теория квантовых вычислений

1. Формальное определение квантовых алгоритмов

В этом параграфе приводится более формальный вариант описания квантового компьютера. Мы будем определять квантовый компьютер с оракулом для некоторой словарной функции, сохраняющей длину входного слова. Отметим, что дословно аналогичное определение можно было бы сформулировать и для оракула обыкновенной булевской функции. Опишем последовательно обе части квантового компьютера.

Квантовая часть

Она состоит из двух потенциально бесконечных лент: рабочей и вопросной, конечного списка $\mathcal{U}$ унитарных преобразований, о которых предполагается, что их можно легко реализовать на стандартных физических устройствах, и бесконечного набора $F = \bigcup_{n=1}^{\infty} F_n$ унитарных преобразований, называемых оракулом для сохраняющей длину функции $f : \{0,1\}^* \to \{0,1\}^*$, где всякое F_n действует на 2^{2n}-мерном гильбертовом пространстве, порожденном векторами $\{0,1\}^{2n}$ следующим образом:

$$F_n|\bar{a},\bar{b}\rangle = |\bar{a}, f(\bar{a}) \bigoplus \bar{b}\rangle, \quad \bar{a},\bar{b} \in \{0,1\}^n,$$

где $\bigoplus$ обозначает покомпонентное сложение по модулю 2.

Ячейки лент будем называть кубитами. Каждый кубит принимает значения из комплексной окружности радиуса 1: $\{z_0\mathbf{0} + z_1\mathbf{1} \mid z_1, z_2 \in \mathbb{C}, |z_0|^2 + |z_1|^2 = 1\}$. Здесь $\mathbf{0}$ и $\mathbf{1}$ есть базисные состояния кубита, образующие базис $\mathbb{C}^2$.

В течение всего времени вычислений обе ленты ограничены каждая двумя маркерами, занимающими постоянные позиции, так что на рабочей (вопросной) ленте только кубиты $v_1, v_2, \cdots, v_\tau$ ($v_{\tau+1}, v_{\tau+2}, \cdots, v_{\tau+2n}$) доступны в вычислении с временной сложностью $\tau = \tau(n)$ на входе длины

n. Положим $Q = \{v_1, v_2, \cdots, v_{\tau+2n}\}$. Базисное состояние квантовой части есть функция вида $e : Q \to \{0, 1\}$. Такое состояние можно закодировать как $|e(v_1), e(v_2), \cdots, e(v_{\tau+2n})\rangle$ и естественно отождествить с соответствующим словом в алфавите $\{0, 1\}$. Пусть $K = 2^{\tau+2n}$; $e_0, e_1, \cdots, e_{K-1}$ все базисные состояния, взятые в некотором фиксированном порядке, $\mathcal{H}$ есть K-мерное гильбертово пространство с ортонормированным базисом $e_0, e_1, \cdots, e_{K-1}$. $\mathcal{H}$ можно рассматривать как тензорное произведение $\mathcal{H}_1 \bigotimes \mathcal{H}_2 \bigotimes \cdots \bigotimes \mathcal{H}_{\tau+2n}$ двумерных пространств, где $\mathcal{H}_i$ порождено всевозможными значениями v_i, $i = 1, 2, \cdots, \tau + 2n$. Состояние (чистое) квантовой части есть такой элемент $x \in \mathcal{H}$, что $\|x\| = 1$.

Эволюция рассматриваемой квантовой части во времени определяется двумя типами унитарных преобразований над ее состояниями: рабочими и вопросными. Пусть пара G, U выбрана произвольным образом, так что $G \subset \{1, 2, \cdots, \tau + 2n\}$, $U \in \mathcal{U}$ есть унитарное преобразование в $2^{\mathrm{card}(G)}$-мерном гильбертовом пространстве.

Рабочее преобразование $W_{G,U}$ на $\mathcal{H}$ имеет форму $E \bigotimes U'$, где U' действует как U на $\bigotimes\limits_{i \in G} \mathcal{H}_i$ в рассматриваемом базисе, E действует как тождественный оператор на $\bigotimes\limits_{i \notin G} \mathcal{H}_i$.

Вопросное преобразование Qu_f на $\mathcal{H}$ имеет форму $E \bigotimes F'_n$, где F'_n действует как F_n на $\bigotimes\limits_{i=\tau+1}^{\tau+2n} \mathcal{H}_i$ и E действует как тождественное на $\bigotimes\limits_{i=1}^{\tau} \mathcal{H}_i$.

Наблюдение над квантовой частью. Если квантовая часть находится в состоянии $\chi = \sum\limits_{i=0}^{K-1} \lambda_i e_i$, наблюдением называется случайная величина, принимающая значение e_i с вероятностью $|\lambda_i|^2$.

Классическая часть

Классическая часть компьютера также состоит из двух лент: рабочей и вопросной, ячейки которых находятся во взаимно-однозначном соответствии с соответствующими кубитами квантовых лент компьютера и имеют ограничивающие маркеры на соответствующих позициях. Каждая ячейка классических лент содержит букву из некоторого конечного алфавита ω. Эволюция классической части определяется классической машиной Тьюринга M с несколькими головками на обеих лентах и множеством объединенных состояний головок: $\{q_b, q_w, q_q, q_o, \cdots\}$. Мы обозначаем через $h(C)$ объединенное состояние головок для состояния C классической части.

Пусть D будет множеством всех состояний классической части.

Правило соответствия между квантовой и классической частями имеет вид $R: D \to 2^{\{1,2,\cdots,\tau+2n\}} \times U$, где $\forall C \in D\ R(C) = \langle G, U\rangle$, U действует на $2^{\mathrm{card}(G)}$-мерном гильбертовом пространстве, так что U зависит только от $h(C)$, и элементы G суть в точности номера ячеек в классической части, содержащих специальную букву $a_0 \in \omega$.

Состояние квантового компьютера есть пара $S = \langle Q(S), C(S)\rangle$, где $Q(S)$ и $C(S)$ — состояния квантовой и классической частей соответственно.

Вычисление на квантовом компьютере. Вычислением мы назовем последовательность преобразований следующего вида:

$$S_0 \to S_1 \to \cdots \to S_\tau, \tag{1}$$

где для всякого $i = 0, 1, \cdots, \tau - 1$ $C(S_i) \to C(S_{i+1})$ есть переход, определенный машиной Тьюринга M, причем выполнены следующие свойства:

если $h(C(S_i)) = q_w$, то $Q(S_{i+1}) = W_{R(C(S_i))}(Q(S_i))$,

если $h(C(S_i)) = q_q$, то $Q(S_{i+1}) = \mathrm{Qu}_f(Q(S_i))$,

если $h(C(S_i)) = q_b$, то $i = 0$, $Q(S_0) = e_0$, $C(S_0)$ есть фиксированное начальное состояние, соответствующее входному слову $a \in \{0,1\}^n$,

если $h(C(S_i)) = q_o$, то $i = \tau$,

во всех других случаях $Q(S_{i+1}) = Q(S_i)$.

Мы скажем, что этот квантовый компьютер (QC) вычисляет функцию $F(a)$ с вероятностью $p \geqslant 2/3$, если для вычисления (1.1) на всяком входном слове a наблюдение S_τ с последующей заранее фиксированной рутинной процедурой обработки результата дает $F(a)$ с вероятностью p. Заметим, что при $p < 1$ всегда можно достичь любого большего значения вероятности $p_0 > p$, если выполнить повторные вычисления с тем же входным словом и затем взять в качестве окончательного ответа тот результат, который встречается чаще всех других. Это приведет только к линейному замедлению вычислений по сравнению с прежним уровнем вероятности p. Описанные вычисления называются вычислениями с ограниченной вероятностью ошибки. В случае $p = 1$ мы будем иметь точные вычисления.

Если в вычислении используется оракул, то в качестве основной меры сложности вычисления (1.1) мы будем брать не τ, а число вопросных преобразований в данном вычислении. Таким образом, становится непринципиальным выбор машины Тьюринга в качестве модели эволюции классической части.

Вместо нее можно выбрать любую другую модель классических вычислений: клеточный автомат, нормальный алгоритм и т. п., сложность вычислений от этого не изменится.

2. Почему КК делает перебор вариантов необыкновенно быстро

В этом параграфе мы рассматриваем знаменитый квантовый алгоритм для нахождения решения уравнения $f(x) = 1$, придуманный Л. Гровером (см. [21]). Этот алгоритм находит решение за время порядка квадратного корня из классического времени, т. е. для нахождения решения нужно $O(\sqrt{N})$ обращений к оракулу, соответствующему f. Этот алгоритм имеет огромное число потенциальных приложений в вычислительных задачах, поскольку именно к этой задаче сводятся все задачи на прямой перебор вариантов. Действительно, предположим, что нам надо найти какую-либо строку, обладающую некоторым легко проверяемым свойством P. Несмотря на легкость проверки этого свойства для данной конкретной строки, найти строку с этим свойством очень даже не просто. Для этого надо перебрать довольно большое число всяких других строк, последовательно проверяя каждую. Можно доказать (мы не будем этим утруждать читателя), что при разумном уточнении формулировок иной, кроме перебора, универсальный метод поиска, вообще говоря, невозможен. Такое свойство P можно оформить в виде булевской функции f, так что этому свойству будут удовлетворять в точности решения уравнения $f(x) = 1$. Более того, если P задано в виде алгоритма, то можно и f представить в виде схемы из функциональных элементов, а значит, и составить схему из квантовых функциональных элементов, реализующую квантовый оракул, соответствующий f. Для построения искомого алгоритма GSA (Grover search algorithm) нам понадобится две важных подпрограммы.

3. Алгоритм Гровера

Рассмотрим задачу поиска решения уравнения

$$f(x) = 1 \tag{2}$$

для функции $f : \{0,1\}^n \to \{0,1\}$. Пусть, для простоты, это решение единственно, обозначим его через x_t. Рассмотрим гильбертово пространство квантовых состояний n кубитов, порожденное базисом из элементов $|j\rangle$, $j \in \{0,1\}^n$, то есть $j = 0, 1, \ldots, N-1$, $N = 2^n$. Добавим к нему один кубит, называемый анциллой (вспомогательным регистром), который инициализирован состоянием вида $|\phi = \dfrac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$. Тогда мы имеем:

$$\begin{aligned} Qu_f|x_t\rangle \bigotimes |\phi\rangle &= -|x_t\rangle \bigotimes |\phi\rangle, \\ Qu_f|j\rangle \bigotimes |\phi\rangle &= |j\rangle \bigotimes |\phi\rangle, \ j \neq x_t. \end{aligned} \tag{3}$$

Заметим, что здесь состояние анциллы не изменилось, она как была в начале, так и осталась после операции тензорным сомножителем общего состояния. Определим теперь для произвольного вектора $|a\rangle$ нашего гильбертова пространства операцию отражения всего пространства вдоль этого вектора, действующую так:

$$I_a|b\rangle = \begin{cases} |b\rangle, & \text{если } \langle a|b\rangle = 0, \\ -|a\rangle, & \text{если } a = b. \end{cases} \tag{4}$$

Тогда мы можем написать равенство $Qu_f = I_{x_t}$, имея в виду ограничение действия Qu_f на векторы вида $|a\rangle \bigotimes |\phi\rangle$.

Можно также, используя анциллу, состоящую из $n+1$ кубита, реализовать отражение вдоль вектора единичной длины $|0\rangle$.

3.1. Преобразование Уолша – Адамара

Рассмотрим один из важных и полезных примеров унитарных преобразований — преобразование Уолша – Адамара. Его однокубитовый вариант выглядит так:

$$W = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Его n-кубитовый вариант определяется как независимое действие W на каждом из кубитов: $W^{\bigotimes n}$. Из определения этого преобразования видно, что амплитуда перехода базисного состояния в любое другое одинакова, а знак меняется столько раз, сколько единиц стоят на одинаковых местах в обоих этих состояниях. Мы можем написать общую формулу для этого преобразования как $w_{i,j} = (-1)^{(i \cdot j)}$, где в показателе стоит скалярное произведение бинарных записей чисел i и j. Это означает, что если числа i и j имеют вид $\sum\limits_{s=0}^{n-1} i_s 2^s$ и $\sum\limits_{s=0}^{n-1} j_s 2^s$ соответственно, то $i \cdot j = \sum\limits_{s=0}^{n-1} i_s j_s$. Нетрудно видеть, что $(W^n)^{-1} = W^n$.

Это преобразование замечательно тем, что оно не приводит к запутыванию кубитов. Если первоначальное состояние кубитов было незапутанным, таковым же будет и результат преобразования W^n. Если мы применим это преобразование к n кубитам, находящимся в нулевом состоянии, мы получим состояние вида

$$\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |e_i\rangle. \tag{5}$$

Это состояние замечательно тем, что все амплитуды в нем одинаковы. В силу сказанного в главе 2 это последнее свойство однозначно определяет состояние, так как фазовый множитель $e^{i\phi}$ не имеет никакого физического смысла, и мы можем теперь утверждать, что это — единственное состояние с данным свойством.

3.2. Операция инверсии и ее реализация на квантовом компьютере

Унитарное преобразование инверсии вдоль состояния a определяется по формуле (4). Такое определение формально является неполным, но в силу линейности унитарных операций оно определено данным равенством однозначно. Представив ситуацию геометрически, мы поймем, что это преобразование есть зеркальное отражение всего пространства состояний относительно подпространства, ортогонального вектору a. Как реализовать такую операцию на кванговом компьютере?

Рассмотрим сначала тот случай, когда вектор a нам известен. Для простоты положим $a = 0$ (случаи других базисных состояний отличаются от этого несущественно). Самая простая идея — устроить наш алгоритм так, чтобы он просмотрел последовательно все разряды a на предмет поиска единиц, и если нашел хоть одну, то ничего не делает, а если не нашел ни одной, т. е. $a = 0$, то изменяет знак состояния. Последовательный просмотр устроить очень просто, когда компьютер у нас классический. В квантовом случае есть небольшая трудность, поскольку единиц может быть несколько, и значит, при проходе через все число a мы должны как-то это фиксировать, чтобы у нас получилась последовательность только унитарных операций. Наметим такой план. Устроим специальный дополнительный кубит, называемый res, который будет нам сигналить о том, что встретилась единица в числе a. Кроме того, для соблюдения унитарности заведем для каждого значащего кубита его двойник. Все эти дополнительные кубиты первоначально будут находиться в состоянии 0. Проходов будет два: на первом мы выясним, совпадает ли a с нулевой строкой, а на втором, двигаясь в обратном направлении и совершая обратные преобразования, восстановим содержимое всех дополнительных кубитов, т. е. сделаем их снова нулевыми. Эта последняя операция необходима для того, чтобы делать эту процедуру неоднократно. Такая «очистка мусорной корзины» имеет в квантовом компьютинге и иной смысл, аналогов которому нет в классическом случае. Дело в том, что дополнительные кубиты находятся со значащими в запутанном состоянии, а это значит, что, например, их наблюдение может самым неприятным образом отразиться на кубитах значащих, иначе говоря, испортить необходимую нам информацию.

Итак, мы будем на каждом шаге прохода делать специальную фиксированную операцию V над тремя кубитами: основным, его двойником, и res. На эти кубиты будут указывать специальные указатели. После чего сдвигаем указатели основного кубита и его двойника на один шаг вправо и все повторяется. После первого прохода содержимое res будет сигнализировать о том, встретилась нам хотя бы раз единица или нет. После этого следует условная смена знака, и наконец — все в обратном порядке для чистки мусора. Дело за тем, чтобы определить операцию V. Она должна изменять содержимое res, если первый раз встретила единицу, и при этом быть унитарной. Здесь нам не обойтись без кубитов-двойников. Немного размышлений — и будет видно, что V должна действовать примерно так:

$$\begin{array}{ccccccc} 0 & 0 & 0 & \to & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \to & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & \to & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \to & 1 & 1 & 1 \end{array}.$$

На всех остальных состояниях действие этой операции доопределяется так, чтобы она была взаимно-однозначной.[1] Таким образом, операция инверсии относительно нулевого состояния выразится такой последовательностью рабочих преобразований:

$$V_n V_{n-1} \dots V_1 \; Sign \; V_1^{-1} V_2^{-1} \dots V_n^{-1},$$

где V_j обозначает операцию V, совершенную в момент j, а $Sign$ имеет в базисе $|0\rangle, |1\rangle$ матрицу вида

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

В результате мы будем иметь переход от состояния вида $\psi \bigotimes \bar{0}$ к состоянию $\psi' \bigotimes \bar{0}$, где первый сомножитель отличается от второго только знаком при $|e_0\rangle$.

Теперь не составляет труда построить инверсию относительно состояния ϕ_0, определенного равенством (5). Используя известное определение Уолша – Адамара, мы получаем равенство: $I_{\phi_0} = W^n I_{\bar{0}} W^n$. Следовательно, и эту инверсию легко можно реализовать на квантовом компьютере. Можно сделать и более общее утверждение, которое легко проверить непосредственно. Пусть векторы $|\bar{a}\rangle$ и $|\bar{b}\rangle$ связаны соотношением $|\bar{a}\rangle = U|\bar{b}\rangle$. Тогда

[1] Читателю предлагается реализовать инверсию вдоль $|\bar{0}\rangle$ с помощью гейта Тоффоли $|x, y, z\rangle \to |x, y, z \bigoplus xy\rangle$.

инверсии относительно них будут связаны соотношением $I_{\bar{a}} = UI_{\bar{b}}U^{-1}$. Таким образом, мы можем совершать инверсии относительно любых векторов, если известно, как эти векторы получаются из нулевого. Например, можно случайным образом выбирать преобразование U, и тогда мы будем в состоянии совершить инверсию вдоль случайно выбранного вектора. Отметим, что пока все векторы состояний, относительно которых совершались инверсии, были нам известны в том смысле, что мы располагали способом получить эти состояния нашей квантовой памяти.

А можно ли совершить инверсию относительно того вектора, который нам не известен? Классический компьютер сделать инверсию смог бы, только предварительно найдя этот вектор. Для квантового находить сам вектор нет нужды — достаточно знать, что он является решением уравнения $f(x) = 1$, и иметь в распоряжении оракул для f. Мы сначала опишем не самый хороший способ сделать это. Для простоты мы сначала ограничимся случаем, когда решение уравнения $f(x) = 1$ ровно одно. Обозначим это решение (и соответствующее ему базисное состояние) через tar. Нашей задачей является построение подпрограммы, реализующей I_{tar}. Применим квантовый оракул, соответствующий f и имеющий вид (4.29). После этого изменим знак в зависимости от того, совпадает b с единицей или нет, а затем снова применим оракул. Нетрудно видеть, что последнее действие очистит содержимое b, так что знак изменится именно так, как надо. В чем недостаток этого метода? Дело в том, что оракул здесь применяется дважды. Можно ли добиться того же эффекта, применив его только один раз?

Оказывается, можно. Дополнительный кубит, или, как его называют, анциллу, можно инициализировать в любом состоянии, а не только в нулевом. Важно, чтобы это состояние восстанавливалось после операций. Инициализируем кубит, соответствующий b, в состоянии $\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. Тогда после операции Qu_f вида (4.29) мы получим, что к анцилле прибавляется 1 тогда и только тогда, когда a совпадает с искомым корнем уравнения. Но из вида анциллы следует, что при этом как раз будет изменяться ее знак, поскольку нуль и единица меняются местами. Такой способ требует только одного применения оракула, и потому является оптимальным.

Итак, квантовый компьютер способен инвертировать пространство состояний относительно вектора, который нам неизвестен.

3.3. GSA

Теперь мы уже готовы к тому, чтобы описать метод быстрого квантового перебора. Этот метод удивительно прост: он состоит в последовательном

применении преобразования $G = -I_{\phi_0} I_{tar}$[2] к вектору ϕ_0 $t_0 = \left[\frac{\pi\sqrt{N}}{4}\right]$ раз. Получившееся при этом состояние практически совпадает с искомым tar. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим, как оператор G действует на произвольный вектор. Проще всего задействовать геометрическое воображение. Во-первых, нетрудно понять, что преобразование G преобразует плоскость, порожденную векторами $|tar\rangle$ и ϕ_0, в эту же плоскость (это следует из того, что обе инверсии не выведут нас за пределы этой плоскости). Во-вторых, одна инверсия меняет ориентацию, значит, две инверсии ее сохраняют. Таким образом, G есть ортогональное преобразование плоскости (унитарное и без комплексных коэффициентов). Следовательно, G есть не что иное, как поворот этой плоскости. Рассмотрев действие этого оператора на какую-то фиксированную точку, мы придем к выводу, что G представляет собой поворот на острый угол α, который образован вектором ϕ и вектором $\tilde{0}$, ортогональным $|tar\rangle$. Мы имеем $\alpha \approx \sin\alpha = |\langle tar|\phi\rangle| = 1/\sqrt{N}$, с точностью до $1/N^{3/2}$. Значит, если мы применим G t_0 раз, с точностью до $1/N$ результат совпадет с искомым вектором tar. После этого узнать искомое состояние можно будет, просто измерив состояние квантовой части компьютера.

3.4. Как искать решения, если их много?

До сих пор мы занимались случаем единственного решения нашего уравнения $f(x) = 1$. Что изменится, если решений несколько? Во-первых, можно заметить, что если решений очень много, например их число сравнимо с числом всевозможных значений x, то применение квантового компьютера для поиска любого из этих решений лишено всякого смысла, так как можно просто выбрать x наугад. Итак, будем считать, что решений не очень много; например, можно считать, что их число $O(\sqrt{N})$.

Заметим, что формально мы можем применить GSA и для этого случая. Обе инверсии, входящие в его состав, можно формально выполнить и в случае многих решений. Однако теперь геометрический смысл инверсии I_{tar} будет уже несколько иной. Пусть L_f обозначает подпространство, порожденное всеми решениями $f(x) = 1$. Тогда I_{tar}, которое производится точно так же, как и в случае единственного решения, будет зеркальным отражением всего пространства относительно подпространства, ортогонального к L_f. Действительно, каждое решение будет менять знак; значит, и каждая линейная комбинация решений будет менять знак, а вектор, перпендикулярный ко всем решениям, останется без изменений.

Сделаем еще одно поучительное наблюдение. Как нам известно, инверсию на квантовом компьютере можно совершать не только относительно

[2]Знак минус в определении G взят только для красоты.

состояния ϕ_0, но и относительно любого состояния $\tilde{\phi}_0$, которое мы можем получить для квантовой части компьютера. Рассмотрим проекцию начального состояния $\tilde{\phi}_0$ на подпространство L_f, и пусть теперь tar обозначает новое целевое состояние, направленное вдоль этой проекции (оно отличается от самой проекции только тем, что имеет единичную длину). Тогда мы снова, как и в предыдущем случае, получаем, что плоскость, образованная векторами tar и $\tilde{\phi}_0$, переходит в себя же при применении гроверовского преобразования. В нашем геометрическом рассуждении ничего не изменится, если мы просто заменим ϕ_0 на $\tilde{\phi}_0$. Единственное, что придется нам теперь подправить, это время t_0. Рассуждая по аналогии с предыдущим случаем, мы быстро поймем, что теперь время должно быть $\left[\frac{\pi}{4|\langle tar|\tilde{\phi}_0\rangle|}\right]$.

Отсюда следует интересный вывод. В схеме Гровера мы можем использовать инверсию относительно любого начального состояния ϕ_0, даже выбранного наугад! Действительно, при случайном выборе этого состояния модуль скалярного произведения $|\langle tar|\tilde{\phi}_0\rangle|$ будет иметь порядок $1/\sqrt{N}$. Квадрат этого числа есть вероятность получения состояния tar при измерении состояния $\tilde{\phi}_0$ в каком-либо базисе, содержащем наш вектор tar. Из соображений симметрии, при случайном выборе начального состояния $\tilde{\phi}_0$ эта вероятность должна быть одинакова для всех векторов этого базиса, и значит, должна равняться $1/N$. Из этого, строго говоря, еще не следует, что вероятность получения квадрата из этой величины будет равна $1/\sqrt{N}$.[3] Однако можно доказать, что среднее значение самого модуля будет иметь тот же порядок величины, а именно $1/\sqrt{N}$, с точностью до умножения на константу, не зависящую от N. Так что мы можем смело применять гроверовскую схему для быстрого получения состояний, если у нас есть в распоряжении какой-либо аппарат, осуществляющий инверсию относительно этого состояния. При этом начальный вектор и соответствующее ему преобразование инверсии можно выбирать произвольно, случайным образом.

Однако остается неясным, когда же все-таки производить конечное измерение? Для этого, разумеется, надо знать $|\langle tar|\phi_0\rangle|$. Иначе мы окажемся в положении пассажира на кольцевой железной дороге, который не знает точно, где ему выходить из поезда. Если мы точно знаем количество l всех решений, немного подумав, мы можем сообразить, что этот модуль равен $\sqrt{l/N}$. А что делать, если число решений неизвестно или если мы просто хотим по схеме Гровера получить искомое состояние tar, используя

[3] Разница между средним квадрата величины и квадратом среднего ее значения равна дисперсии этой величины.

соответствующую инверсию? Здесь мы встречаемся с тем случаем, когда удобно применить промежуточные измерения.

3.5. Когда бывает удобно часто измерять

Итак, пусть мы не знаем общего числа решений. Если мы остановим наш процесс применения гроверовского преобразования в произвольный момент, меньший $C\sqrt{N}$, где C — достаточно большое число, с какой вероятностью мы получим при измерении искомое нами состояние? Немного подумав, мы должны сообразить, что эта вероятность не должна быть намного меньше 1/2, поскольку наш текущий вектор состояния и векторы tar и $-tar$ с примерно равными вероятностями образуют углы большие и меньшие $\pi/4$. Так что если мы не гонимся за максимально быстрым методом получения целевого состояния, мы можем просто запустить процесс GSA и примерно за $O(\sqrt{N})$ шагов получить ответ с высокой вероятностью, используя повторные попытки. Но при этом мы наверняка упустим возможность быстрого получения ответа тогда, когда в действительности решений много. Например, при $l = O(\sqrt{N})$ упущенная выгода составит $O(N^{1/4})$. Здесь нам на помощь придет очень простая идея: сканировать область времени — до $C\sqrt{N}$ включительно, всякий раз выбирая интервал времени, например, в два раза больший, чем на предыдущем шаге. При этом на каждом шаге будем дополнительно применять измерение в произвольно выбранный момент из текущего интервала. Тогда мы, разумеется, не упустим выгоду в том случае, если решений много, — ответ будет получен за $O(\sqrt{N/L})$ шагов, как и должно. Это следует из того, что время, потраченное почти впустую на измерения при малых временных интервалах до того, как текущий интервал окажется достаточно велик, будет примерно такое же, как и в достаточно большом интервале, ведь сумма геометрической прогрессии примерно совпадает с ее наибольшим членом.

Таким образом, квантовый компьютер обладает возможностью сделать перебор вариантов, не перебирая их все. Эта удивительная возможность целиком опирается на фундаментальные свойства квантовых объектов — интерференцию амплитуд и существование запутанных состояний. Можно легко показать, что всякое квантовое вычисление, не использующее запутанности, т. е. оперирующее с независимыми кубитами, может быть легко реализовано и на классическом компьютере. В начале и в конце вычисления по схеме GSA мы имеем незапутанные состояния, такие как tar или ϕ_0. Однако в середине этой процедуры итераций запутанность растет, дорастает до некоторого предела, а затем начинает падать до нуля. Итак, запутанность в квантовой информатике является своеобразным и абсолютно необ-

ходимым ресурсом, таким же, как солнечный свет для всех живых существ. Физическая природа этого ресурса пока до конца не понятна, и ее исследование представляет собой интереснейшую открытую проблему естествознания.

4. Квантовое преобразование Фурье (QFT)

4.1. Что общего между цветовым зрением и факторизацией целых чисел?

Каждый читатель наверняка знает, что разница в цвете предметов связана с различной длиной волн (или с различной частотой) отраженного ими света. Мы не будем здесь заниматься описанием очень сложного (и пока до конца не понятого) процесса различения частот фотонов в зрительном анализаторе человека, а вместо этого дадим очень схематичную формулировку этой задачи и ее решение с использованием преобразования Фурье.

Представим себе, что у нас есть способ генерации какого-либо гармонического колебания вида $e^{2i\pi\ wx}$, причем его частота ω нам не известна. Задача состоит в том, чтобы определить эту частоту. В этой постановке, конечно, можно считать что $\omega \in [0,1)$. Эта задача является очень общей, и мы будем в каждом случае ее конкретизировать так, что частными случаями окажутся поиск собственных чисел операторов, распознавание структур, и даже факторизация целых чисел! В самой общей формулировке она может быть решена одним мощным приемом, изобретенным в начале XIX века Фурье, — специальным интегральным преобразованием, действующим на функции. Это преобразование и обратное к нему имеет вид:

$$\begin{aligned} F f = \phi(\lambda) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_D e^{-i\lambda x} f(x)\ dx, \\ F^{-1}\phi = f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_D e^{i\lambda x} \phi(\lambda)\ d\lambda. \end{aligned} \tag{6}$$

Пусть на вход этого преобразования подается наше гармоническое колебание $e^{2i\pi\ wx}$. Здесь имеется маленькое затруднение, связанное с тем, что преобразование определено на всей числовой оси $D = R$, и это требует, если рассуждать строго, привлечения обобщенных функций. Чтобы этого избежать, представим себе, что D — это просто большой интервал прямой, например $-B, B$, где B — очень большое число. Тогда мы получим:

$$F f = \phi(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_D e^{i(2\pi\omega - \lambda)x} f(x)\ dx.$$

Теперь мы можем увидеть, что если аргумент результирующей функции λ близок к $2\pi\omega$, то интеграл очень велик, потому что подынтегральная функция близка к единице, а в противном случае этот интеграл небольшой, так как разные части интервала будут вычитаться, или, как говорят физики, деструктивно интерферировать. Так что результирующая функция будет иметь большой пик в точке $\lambda = 2\pi\omega$. Теперь представим, что мы каким-то образом смогли выполнить преобразование Фурье на квантовом компьютере. Тогда в выходном состоянии вся масса амплитуды будет сосредоточена вокруг числа $2\pi\omega$ и измерение выходного состояния с высокой точностью даст нам значение неизвестного параметра ω. В этом и состоит вторая идея применения квантового компьютера. Нужно лишь додуматься, как реализовать на нем преобразование Фурье.

4.2. Квантовое преобразование Фурье и его основное свойство

Попытаемся сначала записать квантовый вариант преобразования Фурье. В силу линейности его действие достаточно определить на базисных элементах. Именно базисные векторы должны играть роль функций f и ϕ в определении. Рассмотрим следующее определение квантового преобразования Фурье

$$\begin{aligned} \mathrm{QFT}: \ |a\rangle &\to \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{b=0}^{N-1} e^{-\frac{2\pi i\, ab}{N}} |b\rangle, \\ \mathrm{QFT}^{-1}: \ |a\rangle &\to \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{b=0}^{N-1} e^{\frac{2\pi i\, ab}{N}} |b\rangle. \end{aligned} \tag{7}$$

Это определение построено по аналогии с обычным. Непосредственно проверяется (мы предлагаем читателю это проделать), что это преобразование отображает базисные векторы во взаимно ортогональные векторы единичной длины, из чего следует его унитарность. Далее, также непосредственно можно убедиться, что эти формулы действительно задают взаимно-обратные преобразования.

Теперь мы можем продемонстрировать, каким образом это преобразование может выявлять скрытые периоды. Сначала нам понадобится ввести одно новое понятие, играющее важную роль в квантовом компьютинге. Это условное применение оператора. Идея состоит в следующем. Предположим, что в нашем распоряжении находится некоторый унитарный оператор U. Мы можем для наглядности считать, что он задан нам в виде соответствующей схемы из функциональных элементов, хотя, вообще говоря, это и необязательно. Далее, пусть у нас имеется некий вспомогательный

квантовый регистр, состоящий из нескольких кубитов, который мы объявим управляющим. Цель состоит в том, чтобы применить оператор U последовательно столько раз, какое число содержится в управляющем регистре. Запишем это формально в виде такого определения:

$$U_{cond}|x,\alpha\rangle \to \begin{cases} |U\ x,\alpha\rangle, & \text{если } \alpha = 1, \\ |x,\alpha\rangle, & \text{если } \alpha = 0. \end{cases}$$

Мы не будем обсуждать здесь вопросы реализации данного преобразования. Заметим только, что если оператор U задан нам в виде схемы из квантовых функциональных элементов, можно легко построить схему такого же типа, реализующую U_{cond}. Для этого достаточно сделать условным каждый оператор, входящий в данную схему. Предоставляем подробности читателю.

Рассмотрим теперь важную задачу определения собственной частоты оператора U. Эта частота будет появляться при измерении некоторого специального регистра из n кубитов, обозначаемого через α, в котором будут храниться последовательные бинарные знаки этой частоты, разумеется, с ограниченной точностью. Мы будем предполагать, что истинная частота может быть записана в этом регистре с абсолютной точностью, это не очень существенно при описании общей схемы рассуждений. Тех читателей, которые заинтересуются общим случаем, мы отсылаем к статье [32]. Таким образом, наш компьютер будет работать с двумя регистрами: регистр для аргумента оператора U и регистр для значения его собственной частоты. В качестве начального состояния выберем $|\xi,\bar{0}\rangle$, где $\xi = \sum\limits_k x_k\psi_k$, а ψ_k — собственные состояния нашего оператора U, соответствующие собственным частотам w_k.

Центральным приемом для проявления собственных частот будет оператор, который для частного случая оператора численного умножения был придуман Шором, а затем обобщен на случай произвольных операторов Абрамсом и Ллойдом. Его определение таково:

$$\mathrm{QFT}_2\ U_{cond}\ \mathrm{QFT}_2. \tag{8}$$

Здесь преобразование Фурье применяется ко второму регистру. Посчитаем, что получится в результате применения этой процедуры к нашему начальному состоянию. Первый оператор преобразования Фурье даст равномерное распределение амплитуд во втором регистре: $= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum\limits_k \sum\limits_{\alpha=0}^{N-1} x_k|\psi_k,\alpha\rangle.$

Оператор условного применения U, с учетом того, что ψ_k — собственные векторы U, даст $U_{cond}|\psi_k,\alpha\rangle = |U^\alpha\psi_k,\alpha\rangle = e^{2i\pi w_k\alpha}|\psi_k,\alpha\rangle$, значит, все состояние после применения условного оператора превратится в $\frac{1}{\sqrt{N}}\sum\limits_k\sum\limits_\alpha e^{2i\pi w_k\alpha}|\psi_k,\alpha\rangle$. Наконец, последнее применение преобразования Фурье даст состояние:

$$\frac{1}{N}\sum_k\sum_c\sum_{\alpha=0}^{N-1} e^{2i\pi\alpha(w_k-\frac{c}{N})}|\psi_k,c\rangle. \tag{9}$$

Если c есть как раз список бинарных знаков w_k, то показатель экспоненты — нуль, и у нас получится при суммировании по α сумма одних единиц в количестве N штук, то есть коэффициент при состоянии с таким c будет равен x_k. Из этого, в силу нормировки — сумма модулей в квадрате всех x_k есть 1, — следует, что при базисных векторах с другими c амплитуда равна нулю. Однако в этом можно убедиться и непосредственно: $\sum\limits_{\alpha=0}^{N-1} e^{2i\pi\alpha\beta} = 0$ при $\beta \neq 0$. Действительно, это есть сумма геометрической прогрессии со знаменателем, не равным 1, для которой последний член равен первому.

Итак, результатом нашей процедуры будет состояние

$$\sum_k |\psi_k, w_k\rangle,$$

где под w_k подразумевается его бинарная запись. Тем самым, если мы наблюдаем это результирующее состояние в базисе, состоящем из собственных векторов оператора U, то мы получим в качестве «приложения» к полученному собственному состоянию бинарную запись соответствующей собственной частоты. В частности, если исходное состояние ξ само было собственным, мы просто получим его частоту.

4.3. Реализация QFT на квантовом компьютере

Для того чтобы применять изложенный метод поиска собственных частот, нам нужно малое — построить квантовый алгоритм для квантового преобразования Фурье, чем мы сейчас и займемся. Договоримся представлять целое число вида $a = a_0 + a_0 2 + \ldots + a_{l-1}2^{l-1}$ базисным состоянием $|a_0\ a_1\ \ldots\ a_{l-1}\rangle$ и располагать все a_j сверху вниз. Такое же соглашение примем и для выхода, только бинарные знаки b_j числа $b = b_0 + b_0 2 + \ldots + b_{l-1}2^{l-1}$ будем писать в обратном порядке — снизу вверх.

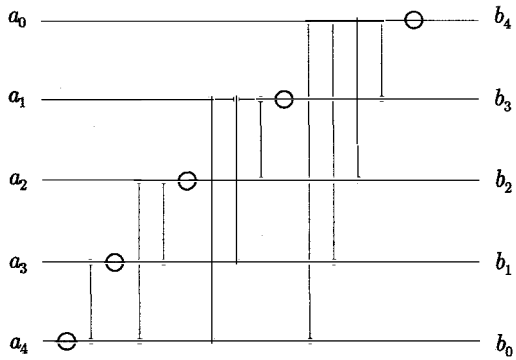


Рис. А.1. Квантовая схема для QFT^{-1}

Окружности здесь обозначают преобразование W^1, двухкубитовые операции имеют вид

$$U_{k,j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\pi/2^{k-j}} \end{pmatrix}, \qquad k > j. \tag{10}$$

Чтобы убедиться в этом, мы рассмотрим амплитуду перехода от базисного состояния a к базисному состоянию b. Это понятие законно, так называется соответствующий элемент матрицы рассматриваемого оператора. Здесь нам придется набраться терпения — подсчет идейно простой, но требует некоторого занудства. Сначала заметим, что модули всех таких амплитуд одинаковы и (так же, как в обратном преобразовании Фурье) равны $1/2^{l/2}$, так что следить надо только за фазовым сдвигом, т.е. за аргументом ϕ комплексной амплитуды $e^{i\phi}$. Мы будем учитывать этот набег фазы, суммируя вклады от преобразований Уолша с вкладами от двухкубитовых фазовых сдвигов. Введем для упрощения счета сокращенное обозначение $b'_j = b_{l-1-j}$, $j = 0, 1, \ldots, l-1$ — это понадобится для того, чтобы в нужный момент учесть обратный порядок расположения бинарных разрядов в a и b. Представим себе, как меняются состояния при продвижении слева направо по проводам нашей схемы. Собственно переход от a к b происходит только при совершении операции Адамара, двухкубитовые операции диагональны и базисные состояния не меняют, добавляя только слагаемые к фазе. Вклад от операции Адамара будет таким: $\pi a_j b'_j$. Это число не равно нулю, только если оба j-х разряда наших входных и выходных чисел равны 1, что

в точности соответствует определению преобразования Адамара. Вклад от двухкубитовой операции при $j < k$ будет $\pi a_j b'_k / 2^{k-j}$, потому что состояние a меняется на b только при прохождении устройства Адамара, и как видно из рисунка А.1, такая двухкубитовая операция совершается в момент, когда j-й кубит еще в состоянии a_j, а k-й — уже в состоянии b'_k. Суммируя все эти слагаемые фазового сдвига и учитывая, что целое кратное π можно вообще в расчет не принимать, получаем вот что:

$$\begin{aligned}
&\pi \sum_{l>k>j\geqslant 0} \frac{a_j b'_k}{2^{k-j}} + \pi \sum_{l>j\geqslant 0} a_j b'_j = \\
&= 2\pi \sum_{l>j+k\geqslant 0} \frac{a_j b_k 2^{j+k}}{2^l} = \\
&= 2\pi \sum_{l>j,k\geqslant 0} \frac{a_j b_k 2^{j+k}}{2^l} = \\
&= \frac{2\pi}{2^l} \sum_{l>j\geqslant 0} a_j 2^j \sum_{l>k\geqslant 0} b_k 2^j = \frac{2\pi}{2^l}.
\end{aligned} \tag{11}$$

Это как раз то, что требуется в определении обратного преобразования Фурье. Если нам понадобится совершить прямое преобразование, достаточно обратить порядок функциональных элементов в рассматриваемой схеме и поставить знак минус перед фазовым сдвигом в определении двухкубитовых операций.

А теперь посмотрим на то, что мы только что совершили. Построенная нами схема, реализующая преобразование Фурье, содержит порядка l^2 функциональных элементов. Заметим, что если мы не будем гнаться за точностью этого преобразования, то можно будет отбросить все двухкубитовые операции, в которых участвуют слишком далекие друг от друга кубиты. Действительно, знаменатель в $\pi/2^{k-j}$ для них делает всю дробь пренебрежимо малой, экспонента будет почти единицей, т. е. такие преобразования почти единичны и их можно отбросить. Схема тогда значительно упростится — ее размер вообще будет линейным — порядка $C\ l$, где константа C будет, конечно, зависеть от выбранной нами точности.

Посмотрим на это с другой стороны. Матрица преобразования Фурье имеет размер $N \times N$, т. е. недоступна нам для непосредственного манипулирования. Памяти классического компьютера не хватит даже для того, чтобы записать ничтожную часть этой матрицы, не говоря уже о том, чтобы с ней что-то делать. Мы же только что построили схему квантового компьюте-

ра доступного (и даже очень маленького) размера, который делает эту колоссальную работу — оперирует с матрицей преобразования Фурье. А это значит, что небольшой вычислитель вполне может справиться и с таким заданием, как определение собственных чисел операторов, распознавание молекулярных структур и их спектров, и делать все задачи, которые на этом основаны, — а это огромный класс задач.

5. Факторизация, оптимизация, моделирование и распознавание

5.1. Факторизация целых чисел

Общий метод нахождения собственных значений, который мы изложили в предыдущем разделе, был первоначально изобретен Шором для частного случая, появляющегося в задаче факторизации целых чисел. Факторизация, или разложение целого числа на простые множители, является известнейшей вычислительной задачей. Известные классические алгоритмы ее решения требуют субэкспоненциального, но не полиномиального числа шагов (алгоритмы решета числового поля). Таким образом, эта задача относится к категории труднорешаемых. Здесь мы изложим квантовый алгоритм для решения задачи факторизации, изобретенный Петером Шором. Этот алгоритм исторически был первым быстрым квантовым алгоритмом, решающим задачу огромной практической важности. Дело в том, что на факторизации целых чисел основан криптографический протокол RSA, который используется в огромном количестве коммерческих приложений, например в системе защиты популярной операционной системы Windows. При этом сам факт того, что задача факторизации считается трудноразрешимой, обеспечивает надежность защиты данных в этом протоколе. В криптографической защите Windows предусмотрен высший уровень защиты, такой, что для его преодоления нужно факторизовать числа с 200 десятичными знаками. Эта задача абсолютно непосильна даже для современных суперкомпьютеров. Квантовый компьютер всего с 1 000 кубит менее чем 1ГГц частоты способен справиться с такой задачей за несколько минут. Таким образом, практическое создание такого рода машин означало бы конец современной криптографии.

Однако у алгоритма Шора есть и большое чисто теоретическое значение. На этом примере можно проиллюстрировать важность того контекста, в котором применяется преобразование Фурье, а именно — важность вспомогательных преобразований. Дело в том, что основное время в этом алгоритме затрачивается не на сложное с классической точки зрения преобразование Фурье, а на умножение целых чисел!

Итак, займемся задачей факторизации. Пусть нам надо найти неизвестное нетривиальное разложение $q = q_1 q_2$ известного натурального числа q на множители. Эта задача может быть сведена к задаче отыскания наименьшего мультипликативного периода r произвольного целого числа y по модулю q: $y^r \equiv 1 \pmod{q}$. Кратко говоря, это сведение таково. Пусть у нас есть метод нахождения r. Будем выбирать y случайно и находить r. Тогда с неисчезающе малой вероятностью окажется, что r четно. В этом случае получается $y^r - 1 = (y^{r/2} - 1)(y^{r/2} + 1) \equiv 1 \pmod{q}$, тогда один из множителей является делителем кратного q числа и мы получаем с неисчезающей вероятностью факторизацию самого q. Таким образом, нам достаточно научиться быстро находить r при заданных q и y. Здесь можно усмотреть аналогию с нахождением неизвестного периода, только в качестве оператора U будет выступать операция умножения на число y.

Мы подберем n так, чтобы $2^{n-1} \leqslant q < 2^n$, и будем работать с квантовой памятью из n кубитов. Рассмотрим такой оператор U: $U|x\rangle \to |yx \pmod{q}\rangle$, где yx есть просто числовое умножение. Чтобы сделать так, что он действует на всех наших базисных векторах, мы будем считать, что это равенство определяет оператор только на числах, меньших q, а на всех остальных, $q, q+1, \ldots, 2^n - 1$, пусть он действует как тождественный оператор. Имеется еще одно небольшое затруднение: такой оператор может быть не унитарным. Если y и q имеют общие делители, некоторые элементы будут «склеиваться». Для исключения такой неприятности будем считать что они взаимно-простые: $(y, q) = 1$. Поскольку y выбирается случайно, то с неисчезающей вероятностью именно так и окажется. Теперь все в порядке. Мы можем применить к нашему оператору мощную технику квантового компьютинга, развитую нами. Собственные векторы U имеют вид $\frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{j=0}^{r-1} \exp(-2\pi i\, kj/r)|y^j \pmod{q}\rangle$, и соответствующие собственные значения будут $\exp(2\pi i\, j/r)$. Если мы применим процедуру проявления собственных частот из предыдущей части, то после измерения получим число j/r.[4] Зная с высокой точностью двоичное приближение дроби, легко найти ее знаменатель, если предположить, что дробь несократима. Формальный алгоритм для такого поиска основан на методе непрерывных дробей и может быть найден, например, в [25]. А эта дробь действительно будет несократима с неисчезающей вероятностью, поскольку всевозможные j здесь появляются равновероятно в том случае, если мы позаботимся о том, чтобы начальное состояние ξ для процедуры проявления (см. преды-

[4] В действительности мы получим приближение этого числа с точностью до $O(1/N)$ с высокой вероятностью. Детали доказательства можно найти в статье [40].

дущий параграф) выбиралось бы произвольно. Тогда мы, повторяя описанную процедуру многократно, будем достаточно часто получать значения j, взаимно-простые с r, и таким образом сможем найти само r. Это и есть алгоритм Шора.

Теперь наступил самый интересный момент: мы будем подсчитывать, насколько же этот алгоритм хорош. Что касается преобразования Фурье, здесь все понятно — оно делается очень быстро, вообще говоря, за время, линейное относительно длины записи числа q, которое нам надо факторизовать. Но имеется другая очень рутинная операция, которая грозит свести на нет все преимущество квантового преобразования Фурье. Это операция умножения на число y, которая входит в оператор условного применения U_{cond}. Для получения U^{α} нам надо умножать на y α раз, а это порядка q действий. Эта трудность в общем случае применения преобразования Фурье в квантовом компьютинге носит принципиальный характер. Для произвольного оператора U ее нельзя устранить. Однако в случае факторизации нам фантастически везет — можно осуществить условное применение за время порядка $\log^2 q$. Чтобы умножить на число y^{α}, мы будем получать само число y^{α} последовательным возведением в квадрат, начиная с y: $y, y^2, y^4, \ldots$. Разумеется, на каждом шаге мы будем брать остаток при делении на q. Так можно довести дело до ближайшей к y степени двойки: 2^{l_1}. Затем возьмем частное $q/2^{l_1}$ и поступим с ним так же, и т. д. Тогда мы доберемся до y за время порядка логарифма от q, то есть за число шагов порядка длины записи числа q. На каждом шаге надо потратить $\log^2 q$ действий для вычисления произведения чисел методом «столбика», и в итоге мы получим реализацию оператора условного применения U за время $O(\log^3 q)$.

Это и будет сложностью алгоритма Шора. Мы видим, что наиболее трудоемкой частью этого алгоритма является рутинная операция, входящая в процесс подготовки входного состояния для преобразования Фурье, — последовательное умножение натуральных чисел.

5.2. Решение задач дискретной оптимизации

Продолжим рассмотрение примеров таких задач, для которых быстрые квантовые алгоритмы получаются некоторой удачной модификацией или комбинацией основных квантовых трюков — GSA и QFT. Сначала рассмотрим естественное обобщение переборной задачи — поиск точки экстремума целочисленной функции. Пусть функция $f: \{0,1\}^n \to \{0,1\}^n$ задана своим оракулом (или схемой из функциональных элементов). Ее мы будем, как всегда, трактовать как целочисленную функцию. Задача состоит в том,

чтобы найти ее точку максимума (или минимума). Заметим, что в случае такой очень общей формулировки задачи дискретной оптимизации мы не можем применить какой-либо прием, существенно упрощающий перебор, например, симплекс-метод или дифференцирование. Таким образом, классическое решение этой задачи требует порядка $N = 2^n$ действий.

Рассмотрим идею квантового метода ее решения, основанного на применении GSA. Будем находить точку максимума с помощью последовательных приближений. А именно, расположим все аргументы в порядке возрастания значения функции f на них: $f(x_0) \leqslant f(x_1) \leqslant \ldots \leqslant f(x_{N-1})$. На каждом j-м шаге входным значением будет некоторое x_{j_k}. Применим G-BBHT с оракулом, принимающим значение 1 в точности на тех аргументах x_j, для которых $f(x_{j_k}) < f(x_j)$, т. е. на $x_{j'}$, $j' > j_k$. После очередных наблюдений и проверок правильности мы получим следующее значение $x_{j_{k+1}}$ и т. д., до тех пор, пока не доберемся до x_{N-1}. Детальный анализ (см. например, [16]) показывает, что сложность такого алгоритма имеет порядок $\sqrt{N}$, то есть дает такое же ускорение, как и GSA.

5.3. Распознавание структур и функций

Список задач, в которых применение квантовых вычислений дает принципиальный выигрыш, слишком велик для того, чтобы приводить его в этой небольшой книжке. Мы завершаем эту тему рассмотрением задач распознавания устройств, которые можно кратко сформулировать как прямую и обратную задачи:

1) по заданной схеме устройства определить его функции,

2) по заданным функциям восстановить схему устройства.

Задачи такого типа часто встречаются в инженерной практике. Мы используем понятие собственных частот для уточнения этих формулировок. Будем считать, что устройством будет схема из квантовых элементов, а функцией этого устройства будем называть унитарный оператор, который она генерирует. Тогда функция будет полностью задана, если мы зададим собственные частоты и для каждой собственной частоты укажем соответствующее ей подпространство собственных векторов. Сначала мы сузим задачу и будем рассматривать только собственные частоты, игнорируя собственные векторы. Здесь получаются такие вопросы:

а) по данной схеме, генерирующей оператор U, и числу $w \in [0, 1)$ определить, является ли оно собственной частотой оператора U;

б) по данному набору чисел и схеме определить, входит ли спектр (набор собственных частот) оператора, генерируемого этой схемой, в данный набор;

в) по данному набору частот построить схему, генерирующую соответствующий оператор.

Другого типа задача получится, если использовать физическую функциональность прибора с неизвестной схемой:

г) имея оракул для оператора U или U_{cond}, найти генерирующую его квантовую схему.

Эти задачи расположены в порядке нарастающей трудности. Рассмотрим вкратце общую схему решения первой из них. Обозначим построенный ранее оператор, выявляющий собственные частоты, через Rev. Аналогичным способом мы можем построить обратный оператор. Теперь, имея состояние $\sum\limits_k x_k|\psi_k\rangle$, мы можем обратить знак при том ψ_k, который соответствует заданной частоте w. Делается это так: сначала с помощью Rev мы проявляем значение частоты ω_k — она появляется в дополнительном регистре, затем меняем знак при условии $w = \omega_k$ — это делается так же, как и инверсия относительно нуля в GSA, а затем с помощью Rev^{-1} очищается дополнительный регистр. Теперь, имея инверсию относительно подпространства собственной частоты w, мы можем применить схему GSA и получить вектор из этого подпространства, после чего, опять-таки с помощью Rev, проверить, действительно ли этот вектор — собственный с собственной частотой w. Если w — собственная частота, все упомянутые инверсии будут нетривиальными, если же это — не собственная частота, инверсии будут тождественными, и мы в результате вместо вращения текущего вектора по методу GSA получим просто отсутствие всякого движения — исходный вектор алгоритма будет и результирующим. При этом будут появляться неточности из-за незнания нами момента окончания процесса GSA. С ними можно успешно бороться, используя параллельные вычисления.[5]

Перейдем ко второй задаче. Здесь нам придется устраивать два вложенных GSA-процесса, действующих на двух разных регистрах. Внешний (основной) GSA-процесс действует на регистре для частот, его цель — найти частоту, входящую в заданный список и не являющуюся собственной. Для этого необходима инверсия относительно таких «нехороших» частот. Для построения этой инверсии используется алгоритм из предыдущего пункта, содержащий внутренний GSA-процесс, действующий при фиксированном содержимом регистра частот на регистре для аргумента U.

Наконец, для решения третьего типа задач придется использовать GSA-процессы тройной вложенности. Для основного внешнего процесса мы заведем новый регистр, в котором будут храниться двоичные коды возможных схем. Рассмотренный в предыдущем пункте алгоритм войдет во

[5]Подробности можно найти в статье [34].

внутренний процесс, задачей которого будет инверсия вдоль кода тех самых схем, которые генерируют операторы с подходящим спектром. Эта инверсия используется во внешнем GSA-процессе, получающем код искомой схемы.

В рассмотренных задачах использовались, по существу, только коды схем. Задача типа г) имеет существенное отличие: нам потребуется оракул для преобразования U_{cond}. Мы не будем здесь обсуждать вопрос о возможности использования самого оператора U. Для подбора схемы, соответствующей данному оракулу, опять используются GSA-процессы тройной вложенности. Смысл регистров будет таким же, как и в предыдущем случае.

6. Обобщения алгоритма Гровера

Рассмотрим более общую формулировку задачи квантового поиска, при которой у нас имеется m типов состояний: множество N_1 основных состояний, которые не будут вообще подвергаться изменениям при инверсии, множество N_2 целевых состояний, которые вращаются на π и являются решениями уравнения $f(x) = 1$, и $m-2$ всех прочих типов состояний числом, соответственно, $N_3, N_4, \ldots, N_m$, которые будут поворачиваться на $m-2$ различных углов: $d_1, d_2, \ldots, d_{m-2}$ соответственно. Занумеруем элементы из множества N_s так что $N_s = \{x_s^j;\ j = 1, 2, \ldots, l_s\}$, $s = 1, 2, \ldots, m$. Тогда целевые состояния будут $x_2^1, x_2^2, \ldots, x_2^{l_2}$, и число всех базисных векторов $\sum\limits_{s=1}^{m} l_s = N$ есть размерность основного гильбертова пространства H. Обозначим этот ортонормированный базис H через $\bar{N}$.

Наше предположение об углах поворотов можно переформулировать как ограничение, наложенное на унитарное преобразование U, которое будет использовано в определении GSA вместо I_{tar}. Пусть U будет унитарным преобразованием на H с собственными векторами x_j^s ($s = 1, 2, \ldots, m$, $j = 1, 2, \ldots, l_s$), и собственными значениями всех x_j^2, равными -1, а для всех x_j^1 — равными 1, а для всех x_j^s ($s \geqslant 3$) равными $e^{i(d_k - \pi)}$, $d_k \in [0, 2\pi)$. Пусть $v_k = e^{id_k}$.

Определим k как такой индекс, при котором d_k максимален. Пусть $d = d_k$. Определим $\gamma = \sqrt{\dfrac{l_2}{N}}$. Положим $\gamma \to 0$ ($n \to \infty$), поскольку иначе проблема может быть тривиально решена на классическом компьютере и применение квантового компьютера не имеет смысла. Теперь определим $e_j = \dfrac{1}{\sqrt{l_j}} \sum\limits_{x \in N_j} |x\rangle$. Таким образом, например e_2 будет суперпозицией всех

целевых состояний с равными амплитудами. Определим $\tilde{0}$ как $\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x \in \tilde{N}} |x\rangle$. Это состояние будет начальным для нашего алгоритма. Обозначим через H_0 подпространство, порожденное всеми векторами e_j. Эволюция вектора состояния будет вращением в этом m-мерном подпространстве. Из нашего определения этого подпространства непосредственно вытекает, что начальный вектор $\tilde{0}$ принадлежит этому подпространству. С другой стороны, действие I_{tar}, ограниченное на H_0, будет совпадать с ограничением преобразования I_{e_2} на H_0.

Наш основной результат будет таким.

Теорема 1. *Пусть* $l_1/N \to 1$, $(N - l_1 - l_2)/d\sqrt{Nl_2} \to 0$, $\sqrt{\frac{l_2}{N}} = o(d)$ *и* $t = \left[\frac{\pi}{4}\sqrt{\frac{l_2}{N}}\right]$, *тогда итерированные преобразования* $I_{\tilde{0}}U$, *примененные к* $\tilde{0}$ t *раз, с последующим наблюдением, дают нам состояние* e_2 *с исчезающей вероятностью ошибки* $(n \to \infty)$.

Мы будем работать с подпространством H_0 основного пространства. $I_{\tilde{0}}$ и U сохраняет это подпространство. Идея доказательства следующая. Мы подсчитаем собственные векторы и собственные значения матрицы $G = -I_{\tilde{0}}U$ и сравним их с соответствующими собственными векторами и значениями матрицы стандартного GSA-оператора $I_{\tilde{0}}I_{tar}$. Окажется, что двумерное подпространство H_0, порожденное состояниями e_2 и $\tilde{0}$, а также собственные векторы и собственные значения G будут совпадать с аналогичными величинами для GSA с высокой точностью. Это означает, что поведение итераций G будет таким же, что и GSA. Иными словами, эволюция вектора состояния, порождаемая нашим алгоритмом, может быть с высокой точностью описана как эволюция в двумерном подпространстве, порожденном векторами e_1 и e_2.

6.1. Вычисление матриц

6.1.1. Приближенное вычисление

Оставшаяся часть этого параграфа посвящена, в основном, доказательству теоремы 1. Мы будем вычислять все матрицы в базисе $e_1, e_2, \ldots, e_m$ подпространства H_0. Определим $\langle\tilde{0}\,|e_2\rangle = \sqrt{\frac{l_2}{N}} = X$, $\langle\tilde{0}\,|e_j\rangle = \sqrt{\frac{l_j}{N}} = Y_{j-2}$, $j = 3, 4, \ldots, n$, $x_j = 2X_j$. В этом параграфе мы будем выполнять

все вычисления с точностью до $\sum_{j=2}^{m} l_j/N$. Обоснование законности такого подхода будет дано в следующем параграфе.

Положим $\sum_{j\geqslant 2} l_j/N = \epsilon$. Мы имеем: $\tilde{0} = (\sqrt{1-\epsilon}, X, Y_1, \ldots, Y_{m-2})^T$, $\sqrt{\frac{l_1}{N}} = \sqrt{1-\epsilon} = 1 - \frac{\epsilon}{2} + o(\epsilon)$. Тогда $\tilde{0} \approx \tilde{0}_{app} = (1, X, Y_1, \ldots, Y_{m-2})^T$ с точностью до $O(\epsilon)$, где расстояние между векторами оценивается в гильбертовом пространстве H_0.

Непосредственно из определений следует, что H_0 является подпространством, инвариантным относительно операторов U и $I_{\tilde{0}}$. В m-мерном подпространстве H_0 матрица оператора U будет иметь такой вид:

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & -v_1 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & -v_{m-2} \end{pmatrix}.$$

Чтобы найти матрицу для $I_{\tilde{0}}$ в этом подпространстве, мы представим оператор в виде $I_{\tilde{0}} \approx I_{\tilde{0}_{app}} = V^{-1} I_{e_1} V$, где матрица V такова, что $V\tilde{0}_{app} = e_1$. Это происходит потому, что $V^{-1} I_{e_1} V \tilde{0}_{app} = -V^{-1} e_1 = -\tilde{0}_{app}$. Непосредственно проверяется, что матрица V и ее обратная имеют вид

$$V = \begin{pmatrix} 1 & X & Y_1 & Y_2 & \ldots & Y_{m-2} \\ -X & 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ -Y_1 & 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ -Y_{m-2} & 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 \end{pmatrix},$$

$$V^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -X & -Y_1 & -Y_2 & \ldots & -Y_{m-2} \\ X & 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ Y_1 & 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ Y_{m-2} & 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 \end{pmatrix}.$$

Мы далее имеем:

$$I_{e_1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix}.$$

И теперь непосредственное умножение матриц дает

$$I_{\tilde{0}_{app}} = V^{-1} I_{e_1} V = \begin{pmatrix} -1 & -x & -y_1 & -y_2 & \dots & -y_{m-2} \\ -x & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -y_1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -y_{m-2} & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

$$G = -I_{\tilde{0}_{app}} U = \begin{pmatrix} 1 & -x & -y_1 v_1 & -y_2 v_2 & \dots & -y_{m-2} v_{m-2} \\ x & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ y_1 & 0 & v_1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ y_{m-2} & 0 & 0 & 0 & \dots & v_{m-2} \end{pmatrix}.$$

6.1.2. Точность приближения

Теперь мы покажем, что для целей приближения GSA наша точность до ϵ достаточна. Мы будем работать с обычной матричной нормой, заданной равенством

$$\|A\| = \max_{\|\bar{x}\|=1} \|A\bar{x}\|.$$

Точность нашего приближения $G = -I_{\tilde{0}_{app}} U$ к точной матрице $-I_{\tilde{0}} U$, которая будет обозначаться через G_{exact}, есть $\|G - G_{exact}\| = \|U\| \|I_{\tilde{0}} - I_{\tilde{0}_{app}}\| = \|I_{\tilde{0}} - I_{\tilde{0}_{app}}\| = \|\tilde{0} - \tilde{0}_{app}\| = O(\epsilon)$. Следовательно, G есть приближение G_{exact} с точностью до ϵ, и мы можем представить ее как $G = G_{exact} + \Delta$, где $\|\Delta\| = O(\epsilon)$. Пусть $t = \sqrt{\dfrac{N}{l_2}}$ есть порядок числа итераций в GSA. Оценим число $\nu = t\Delta = \dfrac{\sum\limits_{j \geqslant 2} l_j}{\sqrt{N l_2}}$. Если $l_2 = O(\sum\limits_{j \geqslant 3})$, мы можем опустить l_2 и, используя условие теоремы, получить $\nu = o(1)$. В противном случае $\sum\limits_{j \geqslant 3} = o(l_2)$ и ν будет порядка $\sqrt{\dfrac{l_2}{N}}$, что снова дает $o(1)$. Значит, во всех случаях $\nu = o(1)$. Тогда мы имеем: $G^t = (G_{exact} + \Delta)^t = G^t_{exact} + O(t\Delta G^{t-1}_{exact}) = G^t_{exact} + o(1)$. Это значит, что для исследования поведения G^t_{exact} будет достаточно использовать приближение G к G_{exact}, что и обосновывает наши вычисления.

6.2. Нахождение собственных значений

Чтобы найти собственные значения G, нам следует сначала посчитать характеристический многочлен $p_{m-2}(\lambda) = |G - \lambda I|$, где I — идентичная

матрица. Затем, решая реккурентно уравнение $p_{m-2}(\lambda) = 0$, мы найдем собственные значения. Мы имеем

$$p_{m-2}(\lambda) = \begin{vmatrix} 1-\lambda & -x & -y_1v_1 & -y_2v_2 & \dots & -y_{m-2}v_{m-2} \\ x & 1-\lambda & 0 & 0 & \dots & 0 \\ y_1 & 0 & v_1-\lambda & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ y_{m-2} & 0 & 0 & 0 & \dots & v_{m-2}-\lambda \end{vmatrix} =$$

$$= (-1)^{m+1} y_{m-2}v_{m-2} \begin{vmatrix} x & 1-\lambda & 0 & \dots & 0 \\ y_1 & 0 & v_1-\lambda & \dots & 0 \\ y_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ y_{m-2} & 0 & 0 & \dots & 0 \end{vmatrix} +$$

$$+(v_{m-2}-\lambda)p_{m-3}(\lambda) =$$

$$= y_{m-2}^2 v_{m-2}(1-\lambda)(v_1-\lambda)\dots(v_{m-3}-\lambda) + (v_{m-2}-\lambda)p_{m-3}(\lambda),$$

что дает следующее реккурентное соотношение

$$p_{m-2}(\lambda) = \\ = (v_{m-2}-\lambda)p_{m-3}(\lambda) + y_{m-2}^2 v_{m-2}(1-\lambda)(v_1-\lambda)\dots(v_{m-3}-\lambda). \quad (12)$$

Используя базис рекурсии

$$-p_1(\lambda) = (\lambda - 1 + ix)(\lambda - 1 - ix)(v_1 - \lambda) + v_1 y_1^2(1-\lambda),$$

мы можем вывести из основного уравнения (1) с помощью непосредственных преобразований общую формулу для характеристического многочлена:

$$\begin{aligned} p_{m-2}(\lambda) = \; & (\lambda - 1 + ix)(\lambda - 1 - ix)(v_1 - \lambda)(v_2 - \lambda)\dots(v_{m-2} - \lambda) + \\ & + v_1 y_1^2(1-\lambda)(v_2-\lambda)\dots(v_{m-2}-\lambda) + \\ & + v_2 y_2^2(1-\lambda)(v_1-\lambda)(v_3-\lambda)\dots(v_{m-2}-\lambda) + \\ & + \dots + v_{m-2}y_{m-2}^2(1-\lambda)(v_1-\lambda)\dots(v_{m-3}-\lambda). \end{aligned} \quad (13)$$

Обозначим первое слагаемое в (12) через $p_0(\lambda) = (\lambda - 1 + ix)(\lambda - 1 - ix)(v_1 - \lambda)(v_2 - \lambda)\dots(v_{m-2} - \lambda)$, так что $p_{m-2}(\lambda) = p_0 + \delta$, где

$$\begin{aligned} \delta = \; & v_1 y_1^2(1-\lambda)(v_2-\lambda)\dots(v_{m-2}-\lambda) + \\ & + v_2 y_2^2(1-\lambda)(v_1-\lambda)(v_3-\lambda)\dots(v_{m-2}-\lambda) + \\ & + \dots + v_{m-2}y_{m-2}^2(1-\lambda)(v_1-\lambda)\dots(v_{m-3}-\lambda). \end{aligned}$$

Это означает, что p_{m-2} и $p_0(\lambda)$ отличаются только сдвигом на δ. Корни $p_0(\lambda)$ будут $\lambda_1 = 1 - ix$, $\lambda_2 = 1 + ix$, $\lambda_3 = v_1, \ldots, \lambda_m = v_{m-2}$. Обозначим корни p_{m-2} через $\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2, \ldots, \tilde{\lambda}_m$.

Теперь нам нужно оценить различие между λ_j и $\tilde{\lambda}_j$, используя оценку δ в окрестности двух корней $\lambda_{1,2}$, которые играют главную роль в динамике рассматриваемого алгоритма.

Заметим, что $|\lambda_1 - \lambda_2| = o(|v_j - \lambda_1|)$. С другой стороны, $|\lambda_1 - \lambda_2| \gg \delta^2$. Наш полином p можно приблизить квадратичным полиномом q со старшим коэффициентом $A = \lambda - v = \Omega(d)$ в окрестности λ_1 или λ_2 радиуса $|\lambda_1 - \lambda_2|$. Производная q квадратичного полинома в этой окрестности есть $q = \gamma(v_1 - -\lambda) \cdots (v_{n-2} - \lambda)$. Обозначим разницу между корнями через $\sigma = |\lambda_1 - \tilde{\lambda}_1| + + |\lambda_2 - \tilde{\lambda}_2|$. Тогда $\sigma = O(\delta/q') = \sum\limits_{j=1}^{m-2} \dfrac{v_j y_j^2 (1 - \lambda)}{\gamma(v_j - \lambda)}$. Используя равенства $v_j - \lambda = O(d_j)$, $1 - \lambda = O(\gamma)$, мы заключаем, что $\sigma = O(\frac{1}{d} \sum\limits_{j \geqslant 3} \dfrac{l_j}{N})$ что есть $o(\gamma)$, поскольку по условию теоремы $\sum\limits_{j \geqslant 3} l_j = o(d\sqrt{Nl_2})$. Следовательно, $\tilde{\lambda}_{1,2} = 1 + -ix + o(\gamma)$, $\tilde{\lambda}_3 = v + o(\gamma)$.

6.3. Нахождение собственных векторов

Сначала займемся собственными векторами для двух первых корней: $\tilde{\lambda}_{1,2} = 1 + -ix + o(\gamma)$.

1) $\lambda = 1 - ix + o(\gamma)$. Пусть собственный вектор есть столбец вида $\bar{a} = (a, b, w_1, \ldots, w_{m-2})^T$. Система линейных уравнений, определяющая $\bar{a}$, имеет форму $(G - \lambda E)\bar{a} = \bar{0}$ и может быть записана в виде

$$\begin{pmatrix} ix & -x & -y_1 v_1 & \ldots & -y_{m-2} v_{m-2} \\ x & ix & 0 & \ldots & 0 \\ y_1 & 0 & v_1 - 1 + ix & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ y_{m-2} & 0 & 0 & \ldots & v_{m-2} - 1 + ix \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ w_1 \\ \ldots \\ w_{m-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} o(\gamma) \\ o(\gamma) \\ o(\gamma) \\ \ldots \\ o(\gamma) \end{pmatrix}.$$

Переписывая это в виде системы линейных уравнений, находим

$$\begin{cases} ixa & -xb & -y_1 v_1 w_1 & -\ldots & -y_{m-2} v_{m-2} w_{m-2} & = o(\gamma); \\ xa & +ixb & & & & = o(\gamma); \\ y_1 a & & +(v_1 - 1 + ix) w_1 & & & = o(\gamma); \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots; \\ y_{m-2} a & & & & +(v_{m-2} - 1 + ix) w_{m-2} & = o(\gamma). \end{cases}$$

Предположим, что собственный вектор имеет ограниченную норму, что означает, что все его компоненты ограничены. Решая систему, находим $w_j = \frac{y_j a}{v_j - 1 + ix}$. Применяем условие теоремы $\sqrt{\frac{l_2}{N}} = o(d)$ и заключаем, что $w_j = o(1)$ и с точностью до $o(1)$ $a = i, b = -1$.

2) $\lambda = 1 + ix + o(\gamma)$. Соответствующее вычисление дает $a = i, b = 1$ с точностью до $o(1)$, все $w_j = o(1)$.

3) Для всех других собственных значений мы имеем $a = 0$, $b = 0$ с точностью до $o(\gamma)$, поскольку соответствующие векторы должны быть ортогональны подпространству, порожденному e_1, e_2.

Итак, мы имеем следующую ситуацию.

Если $n \to \infty$, то собственные векторы, принадлежащие подпространству, порожденному e_1, e_2, отличаются на $o(\gamma)$ от соответствующих собственных значений стандартного GSA, и соответствующие собственные векторы отличаются на $o(1)$ от соответствующих собственных векторов стандартного GSA. Это значит, что если число t итераций будет порядка $1/\gamma$ (как и в GSA), то разница между результирующими состояниями GSA и итерированного применения G будет порядка $o(1)$. Теорема 1 доказана.

7. Реалистические модели квантовых компьютеров

Здесь мы изучим фермионные вычисления в формализме чисел заполнения, предложенные в статье [14]. Показано, что для выполнения произвольного квантового вычисления с допущением только незначительного замедления достаточно управлять только туннелированием. При этом взаимодействие между кубитами диагонального типа будет оставаться непрерывным и неуправляемым. Обоснование этого подхода дано с помощью редукции к стандартной модели квантовых вычислений в гильбертовом пространстве с использованием результатов статьи [37] об однокубитовом управлении.

7.1. Об использовании тождественности фермионов

Квантовый компьютер является беспрецедентным экзаменом для современной физики, поскольку он требует такого уровня контроля над объектами наноразмеров, который никогда не достигался искусственным путем. В то время как математическая теория квантового компьютинга хорошо развита, границы его физической реализации представляют серьезный вызов нашему пониманию Природы. Речь идет, по существу, о размере реального зерна в гильбертовом пространстве состояний, по дости-

жении которого мы должны применять конструктивную форму квантовой теории. Вот почему очень важно искать простейшие возможные способы такой реализации, так чтобы они базировались только на основных принципах квантовой механики и содержали бы минимум всевозможных технологических трудностей. Два требования можно сформулировать для таких схем: адекватное описание состояний, формирующих вычислительное гильбертово пространство, и реалистический метод управления вычислениями. Обычно вычислительный элемент — кубит — представляется как некая характеристика, подобная спину, заряду или положению некоторой элементарной частицы. Этот подход хорошо работает для изолированного кубита. Для системы из нескольких кубитов этот подход встречает серьезные трудности. Эти трудности происходят из фундаментального физического принципа неразличимости (или тождественности) частиц одного вида.[6] Чтобы управлять вычислением, мы должны иметь возможность обращения к отдельному кубиту, тогда как различные частицы в принципе являются неразличимыми. Конечно, мы можем различить частицы, размещая их на достаточно большом расстоянии друг от друга, однако в этом случае нам будет очень затруднительно держать их в запутанном состоянии, что совершенно необходимо для производства квантовых вычислений. Одно из решений этой дилеммы состоит в том, чтобы использовать фоковское пространство чисел заполнения для описания квантовых вычислений. Здесь используется естественная идентификация кубитов с энергетическими уровнями в фоковском пространстве, так что единица трактуется как занятый уровень, а нуль — как свободный. Такой подход дает универсальные квантовые вычисления за довольно дорогую цену: требуется управлять не только внешним полем и туннелированием, но и постоянным диагональным взаимодействием между кубитами, а также еще и контактом со сверхпроводником, что означает управление коэффициентами α, β, γ в (21) и управление дополнительным слагаемым $\delta a_k^+ a_j^+ + \delta^* a_k a_j$.

В настоящей работе мы увидим, как уменьшить эту цену, используя идею о непрерывном и неконтролируемом взаимодействии. Для этого нам понадобится две вещи: предположение о том, что исходный гамильтониан взаимодействия для вычислительной системы состоит только из диагональных и туннельных членов, а также модифицированное соответствие между состояниями в пространстве чисел заполнения и вычислительным гильбертовым пространством. Тогда для контроля над квантовыми вычислениями нам понадобится только управлять внешним полем и туннелированием. Такой тип контроля в принципе осуществим посредством лазеров. Основная

[6]Здесь мы используем классический анализ, а потому описанный конструктивный прием с выбором зерна пространственного разрешения не используется.

схема дана ниже. Она базируется на идее о непрерывном неуправляемом взаимодействии, предложенной в работах [35, 37] и адаптированной к языку фоковского пространства чисел заполнения.

7.2. Однокубитовое управление в квантовых вычислениях

Основная трудность в практической реализации квантовых вычислений заключается в том, что технически очень сложно выполнить двухкубитовые преобразования, играющие принципиальную роль в таких вычислениях. Для того чтобы выполнить такое преобразование, мы должны управлять степенью запутанности частиц, которая определяется перекрытием пространственных частей их волновых функций. Однако для производства вычислений требуется также и четкое различение частиц, что возможно, лишь если перекрытие волновых функций достаточно мало. Таким образом, налицо противоречивость требований к физической реализации квантовых вычислений. Мы видим, что двухкубитовые преобразования совершать во всяком случае значительно сложнее, чем однокубитовые. Здесь уместно предложить такой подход. Поскольку взаимодействие частиц с изменением степени запутанности вытекает из волнового уравнения и подтверждается в экспериментах, то двухкубитовые преобразования происходят в ходе естественной временной эволюции квантовой системы. Управлять же такой системой можно при помощи только однокубитовых преобразований, которые гораздо проще контролировать. Итак, мы будем производить вычисления, воздействуя на систему только однокубитовыми импульсами, а двухкубитовые преобразования будут совершаться в фоновом режиме и мы ими управлять не будем. В этом суть предлагаемой модели вычислений с однокубитовым управлением. Такая модель является гораздо более реалистической, чем абстрактная схема квантового компьютера, предполагающая управление двухкубитовым взаимодействием. Отложим пока вопрос о возможностях такого подхода и продемонстрируем, как можно в рамках предлагаемой модели решить конкретную задачу — моделировать поведение многочастичной системы с квадратичным взаимодействием с диагональной матрицей. Основная трудность предлагаемой модели с однокубитовым управлением состоит в том, что двухкубитовое взаимодействие происходит неконтролируемым образом, в частности и с посторонними кубитами, что серьезно искажает схемы квантовых алгоритмов. Для производства вычислений в такой модели нам нужно создать методы коррекции «нежелательных» преобразований с помощью однокубитовых импульсов. Для демонстрации возможностей такого подхода мы сначала покажем, как осуществить квантовое преобразование Фурье в рамках

этой модели. Нашим основным предположением будет то, что матрица гамильтониана двухкубитового взаимодействия имеет диагональную форму. Однако сначала для удобства мы наложим также некоторые ограничения на скорость убывания этого взаимодействия с расстоянием, а именно: будем предполагать, что потенциал взаимодействия падает с расстоянием, как потенциал Юкавы. Затем развитый метод мы сможем применить и для более широкого класса диагональных взаимодействий. Более того, можно будет обобщить этот подход и на тот случай, когда разные пары кубитов взаимодействуют по-разному. Наконец, данный подход будет применен к решению волнового уравнения для системы из нескольких частиц с потенциалом квадратичного типа.

7.2.1. Реализация квантового преобразования Фурье на однокубитовом управлении

Квантовое преобразование Фурье — это ключевая подпрограмма в квантовом компьютинге. Она используется в большом числе других алгоритмов. Простейшая схема квантовых функциональных элементов, реализующая это преобразование, дана на рисунке А.1. Она была использована Шором для быстрой квантовой факторизации (см. [40]). Договоримся представлять целое число вида $a = a_0 + a_0 2 + \ldots + a_{l-1} 2^{l-1}$ базисным состоянием $|a_0\ a_1\ \ldots\ a_{l-1}\rangle = |a\rangle$. Эти состояния формируют ортонормированный базис для входных состояний квантовой схемы функциональных элементов. Располагаем их сверху вниз. Такое же соглашение примем и для выходных состояний схемы, только двоичные b_j знаки числа $b = b_0 + b_0 2 + + \ldots + b_{l-1} 2^{l-1}$ будем располагать в противоположном порядке.

Эта схема выполняет обратное преобразование QFT^{-1} за $O(l^2)$ шагов, тогда как его матрица $N = \exp l$-мерна. Однако в этой схеме требуется двухкубитовое управление — она непосредственно не может быть реализована в рамках нашей модели. Мы покажем, как это можно сделать. Мы будем рассматривать взаимодействия, имеющие вид

$$\text{A) } H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho \end{pmatrix}, \quad \rho > 0, \qquad \text{B) } H = \begin{pmatrix} \rho_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_4 \end{pmatrix}, \tag{14}$$

где все $\rho = \rho_0 \frac{e^{-br}}{r}$, $b = \mathrm{const}$, r есть расстояние между кубитами-частицами и $\rho_1 + \rho_4 \neq \rho_2 + \rho_3$. Расположим l кубитов на одной линии с равными интервалами. Пусть взаимодействие между j-м и k-м кубитами

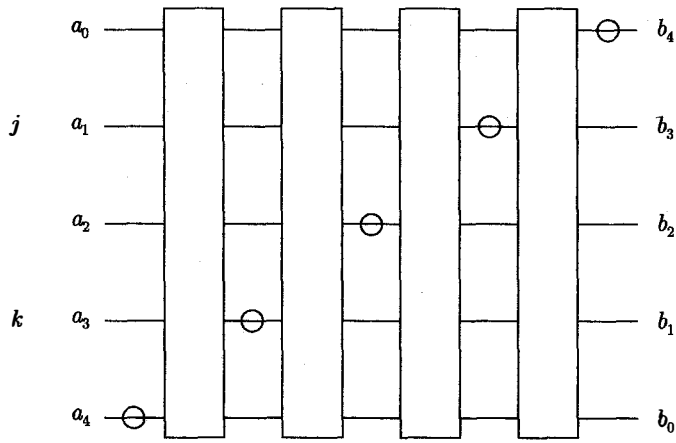


Рис. А.2. Прямоугольники — непрерывное взаимодействие (14, А), кружки — операции Адамара

имеет гамильтониан $H_{j,k}$ вида (14). Этот тип Гамильтонианов возникает, например, в модели Изинга для частиц со спином 1/2. Требуемое уменьшение взаимодействия с расстоянием можно достигнуть, помещая кубиты в подходящую потенциальную яму. Выбрав подходящую единицу длины, мы можем добиться $b = 1$. Сначала будем изучать случай взаимодействия вида (14, А), а затем распространим результаты на случай (14, В).

Реализация QFT с точностью до фазового сдвига

Напомним, что QFT и его обратное имеют вид:

$$\mathrm{QFT}: \ |a\rangle \to \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{b=0}^{N-1} e^{-\frac{2\pi i\, ab}{N}} |b\rangle, \quad \mathrm{QFT}^{-1}: \ |a\rangle \to \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{b=0}^{N-1} e^{\frac{2\pi i\, ab}{N}} |b\rangle. \tag{15}$$

Тогда обратное преобразование можно выполнить с помощью такой схемы. На рис. А.2 прямоугольники обозначают унитарные преобразования вида $U = e^{-i\tilde{H}}$, где $\tilde{H} = \sum_{l>j>k\geqslant 0} \tilde{H}_{j,k}$, а каждое из $\tilde{H}_{j,k}$ имеет вид (14, А) с $\rho_0 = \pi$, $r = j - k$. Если мы выберем единицу времени так, чтобы постоянная Планка, умноженная на ρ_0, равнялась π, и единицу длины так, чтобы $r = j - k$, то U будет в точности преобразованием вектора состояния, индуцируемым рассматриваемым гамильтонианом в единичное время. Здесь мы предполагаем, что время производства однокубитовых операций пренебре-

жимо мало по сравнению с единицей, так что взаимодействие пар кубитов не может сильно изменить фазу за это время. Эта схема может быть получена из предыдущей вставкой недостающих элементов, соответствующих взаимодействию, происходящему в реальных системах с таким гамильтонианом. Чтобы доказать, что эта схема действительно выполняет QFT^{-1}, мы применим метод подсчета амплитуд, предложенный в статье Шора [40]. Если дано базисное входное состояние $|a\rangle$, мы рассмотрим соответствующее выходное состояние. Это выходное состояние будет линейной комбинацией базисных состояний $|b\rangle$ с некоторыми амплитудами. Все модули этих амплитуд одинаковы и равны $1/\sqrt{L}$,а и нам достаточно только следить за их фазами. Для простоты введем обозначение $a'_j = a_{l-1-j}$, $j = 0, 1, \ldots, l - 1$. В процессе применения нашей схемы значения кубитов с номерами j и $k \leqslant j$ проходят через элементы из рисунка А.2 слева направо. Следуя этому направлению, мы выделим следующие 4 типа взаимодействий: взаимодействие a'_j с собой и a'_k с собой в операции Адамара, взаимодействие a'_j с a'_k $(j > k)$, взаимодействие a'_j с b_k для $j > k$ и взаимодействие b_j с b_k $(j > k)$. Время этих взаимодействий будет таким: нуль, k, $j - k$ и $l - 1 - j$ соответственно. Складывая вклады этих взаимодействий в фазу, мы получим результирующую фазу вида

$$\pi \sum_{l>j>k\geqslant 0} \frac{a'_j a_k k}{2^{j-k}(j-k)} + \pi \sum_{l>j>k\geqslant 0} \frac{a'_j b_k (j-k)}{2^{j-k}(j-k)} + \\ + \pi \sum_{l>j\geqslant 0} a'_j b_j + \pi \sum_{l>j>k\geqslant 0} \frac{b_j b_k (l-j-1)}{2^{j-k}(j-k)}, \quad (16)$$

обозначая первое и последнее слагаемые через A и B соответственно. Их вклад соответствует действию диагональных гамильтонианов на $|a\rangle$ и $|b\rangle$ соответственно. Пока оставим эти вклады. Займемся суммой второго и третьего члена этой суммы. После замены j на $l - 1 - j$ эта часть приобретет вид

$$\pi \sum_{l-1>k+j\geqslant 0} \frac{a_j b_k 2^{j+k}}{2^{l-1}} + \pi \sum_{l-1\geqslant j\geqslant 0} a_{l-1-j} b_k = 2\pi \sum_{l>k+j\geqslant 0} \frac{a_j b_k 2^{j+k}}{2^l} = \\ = 2\pi S + 2\pi \sum_{l>k,j\geqslant 0} \frac{a_j b_k 2^{j+k}}{2^l} = 2\pi S + 2\pi \frac{ab}{2^l} \quad (17)$$

для некоторого целого S. Первое слагаемое здесь фазы не меняет, и мы получаем то, что требовалось, с точностью до вклада A и B.

Коррекция сдвига фазы

Для того чтобы учесть вклад диагональных слагаемых A и B в фазу, мы используем следующий прием. Сначала рассмотрим только слагаемое A. Оно состоит из членов вида $A_{j,k} = c_{j,k}a'_j a'_k$, где $c_{j,k}$ зависит только от j и k, но не от a. Объявим j-й и k-й кубиты выделенными. Мы будем применять однокубитовое преобразование NOT несколько раз ко всем кубитам, кроме выделенных, с целью подавить все взаимодействия, кроме взаимодействия между выделенными кубитами. Сначала рассмотрим пару невыделенных кубитов с номерами p, q, $q > p$. Их непрерывное взаимодействие за время Δt дает слагаемое $d_{p,q}\Delta t\, a'_p a'_q$ в фазу, где вещественное число $d_{p,q}$ зависит только от того, как быстро взаимодействие падает с расстоянием, но не от a'_p, a'_q. Например, для убывания типа Юкавы мы будем иметь $d_{p,q} = e^{-|q-p|}/|q-p|$. Теперь инвертируем один из этих двух кубитов, неважно какой, допустим q-й, с помощью операции NOT. Его состояние будет $1 - a'_q$. Теперь второй период длительностью Δt непрерывного взаимодействия даст слагаемое $d_{p,q}\Delta t\, a'_p(1-a'_q)$ в фазу. Наконец, восстановим содержимое q-го кубита вторым применением NOT. Результирующий фазовый сдвиг в этих четырех действиях составит $d_{p,q}\Delta t\, a'_p$, и он зависит только от содержимого p-го кубита. Теперь мы можем компенсировать этот фазовый сдвиг с помощью только одного однокубитового преобразования. Если рассмотреть пару кубитов с номерами p, q, где один, скажем p-й, выделен, а другой — нет, тогда мы можем скомпенсировать их взаимодействие, используя только однокубитовые операции — два NOT для q-го и некоторый фазовый сдвиг для p-го. Теперь нам надо так модифицировать этот метод, чтобы скомпенсировать все влияния невыделенных кубитов одновременно. Для этого мы будем выполнять операции NOT над каждым таким кубитом с достаточно малыми интервалами, так что вклады в фазу невыделенных кубитов будут друг друга сокращать. Есть два способа сделать это: использовать случайный процесс для генерации моментов для однокубитовых операций или осуществлять их периодически с разными периодами для разных кубитов. Сначала рассмотрим первый подход.

Метод случайных процессов

Для каждого невыделенного кубита с номером p рассмотрим Пуассоновский процесс $\mathcal{A}_p$, генерирующий моменты времени $0 < t_1^p < t_2^p < \ldots < t_{m_p}^p < 1$ с некоторой фиксированной плотностью $\lambda \gg 1$. Пусть все $\mathcal{A}_p$ независимы. Теперь выполним операции NOT над каждым кубитом с номером p в моменты t_m^p последовательно. В момент 1 выполняем NOT над p-м кубитом, если и только если m_p нечетно. Таким образом, после этой

процедуры каждый кубит восстановит свое исходное значение. Посчитаем фазовый сдвиг, порождаемый этой процедурой. Взаимодействия между выделенными кубитами остаются незатронутыми. Зафиксируем некоторый невыделенный кубит и посчитаем его вклад в фазу. Он состоит из двух слагаемых: первое происходит из-за взаимодействия с выделенными, а второе — из-за взаимодействия с невыделенными кубитами. Посчитаем их последовательно. 1) Ввиду большой плотности λ пуассоновского процесса $\mathcal{A}_p$ около половины времени p-й кубит будет находиться в состоянии a'_p, а оставшуюся половину — в состоянии $1 - a'_p$. Его взаимодействие с выделенным кубитом, скажем, с j-м, даст вклад $\frac{1}{2}d_{p,j}a'_p a'_j + \frac{1}{2}d_{p,j}(1 - a'_p)a'_j$, то есть $\frac{1}{2}d_{p,j}a'_j$. 2) Рассмотрим различные невыделенные кубиты с номерами $q \neq p$. Ввиду независимости моментов времени совершения NOT- операций над p-м и q-м кубитами и большой плотности λ, эти кубиты будут в каждом из состояний $(a'_p,\ a'_q)$, $(a'_p,\ 1 - a'_q)$, $(1 - a'_p,\ a'_q)$, $(1 - a'_p,\ 1 - a'_q)$ приблизительно четверть всего времени Результирующий вклад будет $\frac{1}{4}d_{p,q}[a'_p a'_q + {}$ $+ a'_p(1 - a'_q) + (1 - a'_p)a'_q + (1 - a'_p)(1 - a'_q)] = \frac{1}{4}d_{p,q}$. Общий фазовый сдвиг, происходящий из-за присутствия невыделенных кубитов, находится теперь суммированием значений из пунктов 1 и 2 для всех $p \notin \{j, k\}$. Это будет

$$\frac{1}{2}\left[\sum_{p \notin \{j,k\}} d_{p,j}a'_j + \sum_{p \notin \{j,k\}} d_{p,k}a'_k\right] + \frac{1}{4}\sum_{p,q \notin \{j,k\}} d_{p,q}.$$

Этот сдвиг может быть скомпенсирован только однокубитовыми преобразованиями, поскольку первые два слагаемых зависят только от значений кубитов, а другие вообще константы. Таким образом, мы получили схему с непрерывным двухкубитовым взаимодействием и однокубитовыми операциями, выполняющую фазовый сдвиг на $d_{j,k}a'_j a'_k$. Если взять временной промежуток Δt вместо единицы времени в этой процедуре, мы получим фазовый сдвиг на $\Delta t\ d_{j,k}a'_j a'_k$. Если мы хотим получить сдвиг на $-\Delta t\ d_{j,k}a'_j a'_k$, мы сначала должны применить NOT к j-му кубиту, затем предыдущую процедуру, затем опять NOT к j-му кубиту и, наконец, прибавить $-\Delta t\ d_{j,k}a'_k$ однокубитовой операцией. Итак, мы можем сделать любой добавок к фазе вида $c \cdot a'_j a'_k$ для вещественного c независимо от его знака. Подходящая комбинация этих схем даст фазовый сдвиг

$$\sum_{j,k} c_{j,k}a'_j a'_k \tag{18}$$

для любого $c_{j,k}$. Размещая эти операции перед и после QFT^{-1} в процедуре из предыдущего пункта, мы компенсируем слагаемые A и B в фазе и получим схему, реализующую QFT^{-1}. Ошибки, возникающие в этой схеме, происходят из возможной некачественности пуассоновских процессов, генерирующих моменты совершения операций NOT, а также из взаимодействия, происходящего в течение этих операций. Они могут быть минимизированы с увеличением плотности λ и уменьшением времени NOT-операций по сравнению с обычным временем двухкубитовых преобразований, определяемых взаимодействием $d_{j,k}$. Оценим замедление, вызванное вставками NOT в большой плотностью по сравнению с абстрактной реализацией квантовых алгоритмов на схемах из функциональных элементах. Зафиксируем единицу времени так, что применение одной операции в схеме требует единичного времени. Пусть время разделено на равные короткие интервалы длины δt единиц, NOT можно выполнять только в моменты вида $k\delta t$ для всякого целого k с вероятностью $p = 1/\lambda$, где λ есть плотность процесса. Пусть время вычисления равно T, и $M = T/\delta t$. Ошибка в сдвиге фазы, проистекающая из некачественности этой модели случайного процесса, будет $\delta t\ D$, где D есть дисперсия суммы случайных величин, принимающих значения 1 и 0 с вероятностями p и $1-p$, что есть $O(\sqrt{M})$. Значит, результирующая ошибка будет порядка $T/\sqrt{M}$ и должна быть пренебрежимо малой. Для QFT мы имеем $T = O(\log N)$, и мы получаем, что $M = O\left(\dfrac{\log^2 N}{\epsilon}\right)$ будет достаточно для исчезающе малой ϵ. Итак, видно, что метод случайных процессов дает немного более квадратичного замедления по сравнению со стандартной моделью, что вполне допустимо в случае таких быстрых алгоритмов, как QFT. Теперь мы докажем универсальность предложенной модели квантовых вычислений. Предположим, что взаимодействие между кубитами зависит только от их пространственного расположения, которое мы будем считать фиксированным. Единственное условие, налагаемое нами на взаимодействие, заключается в том, что оно должно быть диагональным. Таким образом, если j и k обозначают номера двух кубитов, то гамильтониан их взаимодействия имеет один из видов

$$\text{A) } H_{j,k} = \begin{pmatrix} E_1^{j,k} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_2^{j,k} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{j,k} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_4^{j,k} \end{pmatrix}, \qquad \text{B) } H_{j,k} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{j,k} \end{pmatrix},$$

$$E_{j,k} > 0. \quad (19)$$

Сначала заметим, что всякое взаимодействие общего вида (14, A) может быть сведено к виду (14, B) прибавлением подходящих однокубитовых гамильтонианов $H'_{j,k}$, матрицы которых имеют вид

$$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta \end{pmatrix}.$$

Эта добавка приводит гамильтониан вида (19, A) к виду (19, B) и может быть реализована быстрыми однокубитовыми преобразованиями, поскольку все диагональные матрицы коммутируют. Заметим, что разные пары кубитов могут взаимодействовать по-разному, могут быть расположены на различных расстояниях, не обязательно на прямой и т. п. Чтобы доказать универсальность вычислительной модели с непрерывным взаимодействием, мы должны показать, как выполнить произвольную двухкубитовую операцию. Пусть дана униратная операция, индуцированная гамильтонианом (19, B) в течение единичного времени: $U_{j,k} = \exp(-iH_{j,k})$. (Постоянную Планка мы, как всегда, считаем равной 1.) Покажем, как выполнить эту операцию над двумя кубитами j-м и k-м, сохраняя все другие нетронутыми. Именно это последнее условие трудно обеспечить в случае непрерывного взаимодействия. Если мы сможем это сделать, то мы будем в состоянии реализовать любую двухкубитовую операцию над любой парой кубитов. Тогда для дальнего взаимодействия мы будем иметь, самое большее, линейное замедление по сравнению со стандартной моделью квантовых вычислений, а для короткого взаимодействия нам нужно будет выполнять операции SWAP, чтобы свести требуемую пару кубитов вместе, и, таким образом, мы получим ко времени вычисления множитель, пропорциональный размеру памяти. Для осуществления преобразования $U_{j,k}$ надо применить описанный в предыдущем пункте метод преобразований NOT над невыделенными кубитами в моменты времени, которые генерируются независимыми пуассоновскими случайными процессами большой плотности. Однако теперь выгода от такого метода будет не столь очевидна, как в случае QFT, поскольку, например, квантовый перебор требует все-таки не логарифмического времени, а квадратного корня из времени классического вычисления. Для таких случаев можно применить следующую модификацию нашего приема.

Метод периодических NOT

Мы будем совершать преобразования NOT на каждом из j-х кубитов в моменты времени вида $jk\delta t$ для целых k, где δt есть снова малый

временной промежуток. Тогда мы можем повторить конструкцию, описанную выше, и избавиться от нежелательных фазовых сдвигов с помощью надлежащего выбора δt. Этот метод даст замедление в виде сомножителя порядка n^2 по сравнению со сложностью абстрактной модели квантовых функциональных схем. Теперь осталось показать, как с помощью преобразований $U_{j,k}$ можно совершить любое двухкубитовое преобразование. Например, продемонстрируем, как реализуется операция CNOT над данной парой кубитов. Пусть j, k фиксированы, и будем опускать индексы. Обозначим $\Delta E = E_1 - E_2 - E_3 + E_4$. Если $\frac{\Delta E}{\pi} \notin Q$ ($\frac{\Delta E}{\pi}$ не рационально), то (так как физические параметры нашей системы, влияющие на фазы, например, периоды циклов, могут быть немного изменены, чтобы избежать рациональности этого параметра, мы можем предполагать, что он иррационален без ограничения общности) мы можем осуществить операцию CNOT

$$\left[CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \right]$$

над выбранной парой близлежащих кубитов, используя только однокубитовые преобразования и фиксированную двухкубитовую диагональную операцию E $\left[E = \begin{pmatrix} \exp(iE_1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(iE_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp(iE_3) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(iE_4) \end{pmatrix} \right]$ следующим образом.

I. Обозначим последовательность ротаций фазы первого кубита через

$$A = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i(E_1 - E_3)) \end{pmatrix} \right]$$

второго кубита через

$$B = \left[\begin{pmatrix} \exp(-i\ E_1) & 0 \\ 0 & \exp(-i\ E_2), \end{pmatrix} \right]$$

и операцию E через U

$$U = E(A \bigotimes B) = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(i\,\Delta E) \end{pmatrix} \right].$$

II. Используя иррациональность $\frac{\Delta E}{\pi}$, можно показать, что $\forall \varepsilon > 0 \exists m \in \in N \exists n \in N : |\Delta E n - \pi(2m+1)| < \varepsilon$, т. е. при любой выбранной точности ε существует $n = n(\varepsilon)$, такой, что U^n приближает преобразование

$$\Pi = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right]$$

с заданной точностью.

III. Используя соотношение $(I \bigotimes H)\Pi(I \bigotimes H) = CNOT$, где I есть тождественная матрица и H — операция Адамара $H = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \right]$ мы видим, что CNOT получается как последовательность $(I \bigotimes H) \times \times (E(A \bigotimes B))^n (I \bigotimes H)$ однокубитовых ротаций и операции E.

7.3. Формализм чисел заполнения

Рассмотрим систему, состоящую из n одинаковых частиц. Сначала сделаем не вполне физичное предположение о том, что мы можем их надежно различать. Тогда состояние этой системы принадлежит гильбертову пространству с базисом $\psi(r_1, r_2, \ldots, r_n) = \psi_{j_1}(r_1)\psi_{j_2}(r_2) \ldots \psi_{j_n}(r_n)$, где $\{\psi_j\}$ суть некоторый базис для состояний одной частицы, j_s принадлежит некому фиксированному множеству индексов $1, 2, \ldots, J$, так что r_j включает как пространственные, так и так называемые спиновые координаты.[7] Выбор базиса означает, что система после измерения может быть найдена только в каком-либо из базисных состояний.

Однако в реальной системе из идентичных частиц они не могут быть различны. Следовательно, всякое базисное состояние должно содержать все слагаемые вида $\psi_{j_1}(r_1)\psi_{j_2}(r_2)) \ldots \psi_{j_n}(r_n)$ с некоторыми коэффициентами. Теперь нам понадобится некая информация о природе рассматриваемых частиц. Они могут быть либо фермионами (как электроны или протоны), либо бозонами (как фотоны). Разница между этими типами частиц состоит в том, что максимальное значение спина фермионов — полуцелое ($1/2, 3/2$ и т. д.) а у бозонов — целое ($0, 1, 2$, и т. д.). Для нас же существенно то, что волновая функция системы фермионов должна менять свой знак при

[7] Спин — это внутренний момент количества движения частицы, который имеет релятивистскую природу и может принимать разные значения в зависимости от типа рассматриваемых частиц. Например, для электронов проекция спина на выбранную ось после измерения принимает только два возможных значения.

перестановке любых двух частиц, а у системы бозонов — сохранять его. Тогда очень естественно было бы для системы n фермионов представлять базисное состояние в виде детерминанта вида

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_{j_1}(r_1) & \psi_{j_1}(r_2) & \dots & \psi_{j_1}(r_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_{j_n}(r_1) & \psi_{j_n}(r_2) & \dots & \psi_{j_n}(r_n) \end{vmatrix}, \tag{20}$$

а для системы бозонов — в виде перманента матрицы аналогичного вида.[8] Такое состояние можно рассматривать как ситуацию, при которой только состояния ψ_{j_s}, $s = 1, 2, \dots, n$, заняты частицами из нашей системы, а остальные ψ_k, $k \in \{1, 2, \dots, J\}$, не имеющие вида j_s — свободны. Если ψ с индексами обозначает собственный вектор одночастичного гамильтониана, мы говорим о занятых или свободных энергетических уровнях, но, вообще говоря, ψ_k могут образовывать произвольный ортонормированный базис в пространстве состояний одной частицы. Состояние вида (20) может быть представлено как символ $|\bar{n}_\Psi\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_J\rangle$, где n_k есть единица, если k-й энергетический уровень занят, и нуль, если этот уровень свободен. Это естественное представление состояния ансамбля фермионов в терминах чисел заполнения. Такие векторы $\bar{n}$ составляют базис фоковского пространства, и общая форма состояния нашей системы будет иметь вид $\sum\limits_{\bar{n}} \lambda_{\bar{n}} |\bar{n}\rangle$ с амплитудами λ.

Оператор уничтожения a_j частицы в состоянии j-го уровня и его сопряженный оператор a_j^+ (создание) определяются как

$$a_j |n_1, \dots, n_J\rangle = \delta_{1,n_j} (-1)^{\sigma_j} |n_1, \dots, n_{j-1}, n_j - 1, n_{j+1}, \dots, n_J\rangle,$$

где $\sigma_j = n_1 + \dots + n_j$. Они обладают известными коммутационными соотношениями: $a_j^+ a_k + a_k a_j^+ = \delta_{j,k}$, $a_j a_k + a_k a_j = a_j^+ a_k^+ + a_k^+ a_j^+ = 0$.

Предположим, что всякое взаимодействие в природе затрагивает не более двух частиц. Тогда всякое взаимодействие в многочастичном ансамбле может быть разложено в сумму одно- и двухчастичных взаимодействий вида $H = H_{one} + H_{two}$ с соответствующими потенциалами $V_1(r)$ и $V_2(r, r')$. Каждый из них может быть представлен операторами рождения и уничтожения в виде $H_{one} = \sum\limits_{k,l} H_{k,l} a_k^+ a_l$, $H_{two} = \sum\limits_{k,l,m,n} H_{k,l,m,n} a_l^+ a_k^+ a_m a_n$,

[8] Перманент матрицы отличается от ее детерминанта только тем, что при его вычислении нет никаких вычитаний — одни сложения, так что он не меняет величины при перестановке строк или столбцов матрицы.

где

$$H_{k,l} = \langle \psi_k |\ H_{one}\ | \psi_l \rangle = \int \psi_k^*(r) V_1(r) \psi_l(r) dr,$$

$$H_{k,l,m,n} = \langle \psi_l, \psi_k\ | H_{two}\ |\ \psi_m \psi_n \rangle = \int \psi_k^*(r) \psi_l^*(r') V_2(r, r') \psi_m(r) \psi_n(r') dr dr'.$$

Значит, если даны потенциалы всех взаимодействий и все базисные состояния ψ_i, то мы можем, в принципе, найти их представление в терминах операторов рождения и уничтожения, то есть на языке чисел заполнения.

Рассмотрим ансамбль с гамильтонианом вида $H = \sum_i H^i_{ext\,f} + \sum_{i,j}(H^{i,j}_{diag} + H^{i,j}_{tun})$, где гамильтонианы внешних полей, диагонального взаимодействия и туннелирования представляются в терминах операторов рождения и уничтожения как

$$\begin{aligned} H^i_{ext.f.} &= \alpha_i a_i^+ a_i, & \alpha_i \in \mathrm{R}, \\ H^{i,j}_{diag.} &= \beta_{i,j} a_i^+ a_i a_j^+ a_j, & \beta_{i,j} \in \mathrm{R}, \\ H^{i,j}_{tun.} &= \gamma_{i,j} a_i^+ a_j + \gamma^*_{i,j} a_j^+ a_i. \end{aligned} \tag{21}$$

Заметим, что осуществить управление диагональным гамильтонианом было бы непросто, поскольку такое взаимодействие должно было бы затрагивать две произвольные частицы рассматриваемого ансамбля, которые являются неразличимыми по принципу идентичности. Таким образом, логично считать, что такое взаимодействие постоянно и не подвластно нашему контролю, в то время как мы можем эффективно управлять туннельным взаимодействием. При такой форме управления возможно реализовать любое квантовое вычисление. Этот тип контроля представляется более реалистичным, так как туннелированием можно, в принципе, управлять с помощью лазерных импульсов.

7.4. Вычисления, управляемые с помощью туннелирования

Для того чтобы доказать универсальность предлагаемой упрощенной схемы управления фермионными вычислениями, мы должны сделать одно техническое приготовление, а именно, установить несколько иное соотношение между гильбертовым пространством кубитов и фоковским пространством чисел заполнения, чем то естественное соответствие, о котором говорилось выше.

Зафиксируем некоторое разбиение всех энергетических уровней на две равные части и выберем некоторое взаимно-однозначное соответствие меж-

ду этими частями. Для определенности мы можем рассматривать k-й уровень вниз от уровня Ферми ϵ_F и условиться, что он соответствует k-му уровню вверх от ϵ_F. Мы обозначим j-й уровень низах границы Ферми через обычную букву, а j-й уровень вверх от этой границы — через букву со штрихом j'. Назовем первый уровень j-м нижним уровнем, а второй уровень — j-м верхним уровнем. Фоковское пространство $\mathcal{F}$ можно представить как $\mathcal{F} = \mathcal{F}_1 \bigotimes \mathcal{F}_2 \bigotimes \ldots \bigotimes \mathcal{F}_k$, где каждый $\mathcal{F}_j$ соответствует j-й паре соответствующих энергетических уровней. Рассмотрим подпространство F_j в $\mathcal{F}_j$, которое порождено двумя следующими векторами. Первый будет таким: «j'-й уровень занят, а j-й свободен», второй же будет таким: «j-й уровень занят, а j'-й свободен». Обозначаем их через $|1\rangle_j$ и $|0\rangle_j$ соответственно. Мы будем работать с подпространством $F = F_1 \bigotimes F_2 \bigotimes \ldots \bigotimes F_k$ в фоковском пространстве $\mathcal{F}$. Определим функцию θ, которая отображает наше гильбертово пространство $\mathcal{H}$ в F с помощью следующего определения действия на базисных состояниях: $\theta(|\xi_1, \xi_2 \ldots \xi_n\rangle) = |\xi_1\rangle_1 \bigotimes |\xi_2\rangle_2 \bigotimes \ldots \bigotimes |\xi_n\rangle_n$, где все ξ_j есть нули и единицы. Тогда θ устанавливает нестандартное соответствие между гильбертовом и фоковским пространствами (см. рис. А.3).

Однокубитовое состояние в гильбертовом пространстве соответствует двухкубитовому состоянию в обычном отождествлении с кубитами (один уровень — один кубит). Мы увидим, что такое отождествление лучше соответствует нашим целям, чем естественное. Итак, теперь все готово для представления унитарных преобразований в гильбертовом пространстве в терминах операторов, действующих в пространстве чисел заполнения. Рассмотрим эрмитов оператор H в двумерном гильбертовом пространстве состояний одного кубита $\mathcal{H}$. Он имеет вид $H_0 + H_1$, где

$$H_0 = \begin{pmatrix} d_1 & 0 \\ 0 & d_2 \end{pmatrix}, \qquad H_1 = \begin{pmatrix} 0 & d \\ \bar{d} & 0 \end{pmatrix}.$$

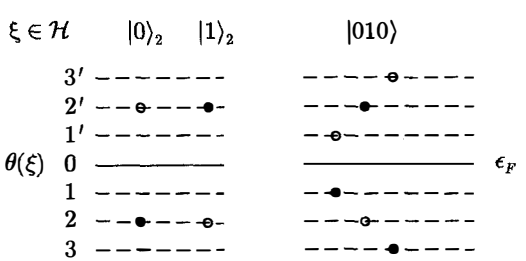


Рис. А.3. Соответствие между фоковским и гильбертовым пространствами

Непосредственно проверяется, что для операторов $\tilde{H}_0 = d_1 a^+{}_k a_k + d_2 a^+{}_{k'} a_{k'}$ и $\tilde{H}_1 = d a^+{}_k a_{k'} + \bar{d}\, a^+{}_{k'} a_k$ (внешнего поля и туннелирования) выполняются равенства $\tilde{H}_i \theta = \theta H_i$ для $i = 0, 1$. Используя линейность θ, мы находим $(\tilde{H}_0 + \tilde{H}_1)\theta = \theta H$. Теперь рассмотрим однокубитовое унитарное преобразование U в гильбертовом пространстве. Оно имеет форму e^{-iH} для гамильтониана H (мы выбрали подходящую единицу времени, чтобы избавиться от постоянной Планка и времени). В силу линейности θ и равенства $\theta^{-1} H^s \theta = (\theta^{-1} H \theta)^s$ для натуральных s мы находим, что для всякого однокубитового унитарного оператора U можно эффективно найти соответствующий гамильтониан в фоковском пространстве, содержащий только внешнее поле и туннелирование, который делает диаграмму A из рисунка A.4 замкнутой.

Займемся двухкубитовыми преобразованиями в гильбертовом пространстве. Поскольку все диагональные матрицы коммутируют, для всех диагональных преобразований в пространстве $\mathcal{F}_k \bigotimes \mathcal{F}_j$ мы можем эффективно найти соответствующий диагональный оператор в гильбертовом пространстве, который делает диаграмму B из рисунка A.4 замкнутой.

Теперь все готово для переноса приема из работы [37] с однокубитовым управлением на фоковское пространство. Комбинация диаграмм из рисунков A.4 даст диаграмму из рисунка A.5.

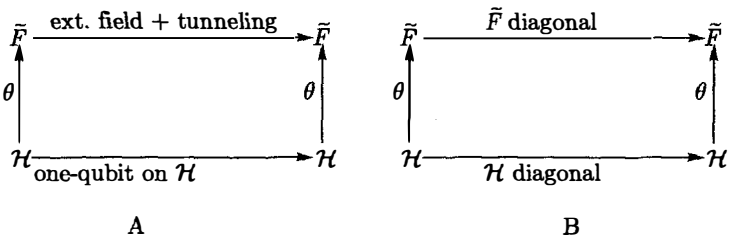


Рис. A.4. Соответствие операторов в фоковском и гильбертовом подпространствах, $\tilde{F} = F_j \bigotimes F_k$

Пусть диагональная часть гамильтониана взаимодействия в фоковском пространстве фиксирована и действует непрерывно в неуправляемом режиме. Тогда мы можем подыскать соответствующее диагональное взаимодействие в гильбертовом пространстве, делая замкнутыми все «диагональные» части диаграммы из рисунка A.5. В силу результата [37] мы можем выбрать однокубитовые преобразования, реализующие управление произвольным квантовым алгоритмом в гильбертовом пространстве, в виде нижней последовательности преобразований в диаграмме. Наконец, мы можем

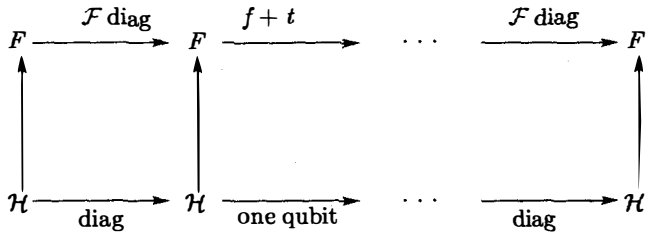


Рис. А.5. Соответствие вычислений в фоковском и гильбертовом пространствах

найти управление вида «поле + туннелирование» над состояниями фоковского пространства, делающие замкнутой всю диаграмму. Заметим, что все операторы рождений и уничтожений, рассматриваемые в целом фоковском пространстве нелокальны благодаря множителю $(-1)^{\sigma_j}$, который зависит от заданного состояния.

Для диагонального оператора $a_j^+ a_j a_k^+ a_k$ и внешнего поля такие множители компенсируются. Туннельный оператор $a_j^+ a_{j'}$ в пространстве F приносит множитель $(-1)^{\sigma'}$, где $\sigma' = \sum_{s+j}^{j'-1} n_s = j' - j$, который не зависит от данного состояния $|\bar{n}\rangle \in F$, поскольку для такого состояния ровно половина уровней между j и j' заняты фермионами. Так что знак может быть вынесен из всех состояний и проигнорирован.

Так мы получим универсальный квантовый компьютер на состояниях в пространстве чисел заполнения, управляемый только внешним полем и туннелированием.

8. Коррекция ошибок в квантовых вычислениях

Своеобразие квантовых состояний проявляется в том, что они очень чувствительны к внешним воздействиям. Это объясняется их сверхмалыми размерами. Например, невозможно полностью изолировать группу атомов в кристаллической решетке от теплового воздействия со стороны других атомов. Мы видели, что есть два принципиально разных типа таких воздействий: внешние поля, включаемые в уравнение Шредингера, и измерения системы. При этом если воздействие внешнего поля вызывает унитарное, то есть обратимое, возмущение состояния системы, то измерение всегда приводит к необратимому изменению этого состояния. Таким образом, в рамках формализма гильбертовых пространств невозможно единым образом эффективно описывать два этих типа внешних воздействий на изучаемую

систему.[9] Таким образом, ошибки в квантовых состояниях бывают двух типов: обратимые, которые могут происходить и в классических состояниях, и необратимые, специфически квантовые. Однако такая классификация ошибок не точно отражает суть дела. Рассмотрим, для примера, состояние $\frac{1}{\sqrt{2}}|000\ldots0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|111\ldots1\rangle$. Ошибка в первом кубите может иметь, например, форму: $|0\rangle \to |1\rangle$, $|1\rangle \to |0\rangle$ или $|0\rangle \to |0\rangle$, $|1\rangle \to |0\rangle$. Первая будет унитарным преобразованием, а вторая — нет. Наше состояние тогда приобретет форму $\xi' = \frac{1}{\sqrt{2}}|100\ldots0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|011\ldots1\rangle$ или $\xi' = \frac{1}{\sqrt{2}}|000\ldots0\rangle + + \frac{1}{\sqrt{2}}|011\ldots1\rangle$ соответственно. Видно, что фактически первоначальное и «испорченное» состояния системы очень близки по виду, и обе ошибки легко скорректировать унитарным преобразованием (во втором случае нужно, конечно, использовать кубиты, не затронутые внешним воздействием). Это происходит из-за того, что обе эти ошибки, по существу, затрагивают содержимое только одного кубита. Рассмотрим теперь измерение одного, скажем, первого кубита. Пусть система находилась в состоянии $\lambda|0,0,0\rangle + + \mu|1,1,1\rangle$. Тогда в результате мы получим одно из состояний $|0,0,0\rangle$ или $|1,1,1\rangle$, потеряв таким образом всю информацию о первоначальных амплитудах. Мы видим, что если кубиты находятся в запутанном состоянии, то измерение одного из них неизбежно порождает ошибку во всех других! Таким образом, более правильным было бы классифицировать все возможные ошибки как локальные, т. е. затрагивающие содержимое только одного кубита, и глобальные, затрагивающие неограниченное число кубитов. При этом в случае запутанного состояния локальные воздействия (измерение) способны привести, как мы только что видели, к глобальным ошибкам. В ходе вычислений естественно будут возникать оба типа ошибок, и нам придется как-то с ними бороться. Ясно, что корректировать локальные ошибки должно быть намного проще, чем глобальные. Можно также предположить, что для коррекции глобальных ошибок, возникающих при локальных воздействиях на систему, необходимо будет использовать чисто квантовый прием, поскольку этот тип не встречается в мире классических систем. И если такой прием существует, его придется использовать многократно в ходе вычислений, поскольку компьютер всегда испытывает воздей-

[9] Можно, конечно, описать эти воздействия формально единым образом, например в виде так называемых супероператоров — унитарных операторов, действующих в расширенном гильбертовом пространстве. Но от такого описания не много пользы, потому что в нем не будет даже той ограниченной детерминистичности, которая присутствует в стандартном квантовом формализме как возможность в принципе точно вычислить волновую функцию изучаемой системы в любое заданное время.

ствие внешней среды, приводящее к возникновению таких ошибок. Таким образом, программа коррекции ошибок в квантовом компьютере должна запускаться в фоновом режиме и постоянно корректировать все возникающие ошибки. Естественно, воздействие внешней среды должно быть локальным и его интенсивность должна быть достаточно низкой, для того чтобы наша программа коррекции успела исправить все ошибки. Оказывается, такой метод коррекции квантовых ошибок существует. Здесь мы приведем упрощенную схему этого метода.

Сначала рассмотрим принцип коррекции классических ошибок. Этот принцип по существу один — избыточное кодирование. Состояние одного бита кодируется m битами, в которых мы просто дублируем содержимое исходного бита. Теперь если в результате ошибок поменялось на противоположное содержимое $\left[\frac{m-1}{2}\right]$ кодирующих битов, мы можем легко восстановить исходное значение, взяв то значение в кодирующих битах, которое принимается большинством. Посмотрим, можно ли применить этот прием для коррекции квантовых состояний. Для этого, во-первых, нужно уметь «размножать» квантовые состояния так же легко, как мы можем копировать состояние классического бита. Здесь нас ожидает первая ловушка. Оказывается, не существует физического процесса, копирующего квантовые состояния! Этот факт известен под громким названием «теорема о запрете клонирования», однако он очень простой, и мы его сейчас установим. Действительно, мы хорошо знаем, что все физические процессы описываются или унитарными преобразованиями, или носят вероятностный характер. Предположим, что существует физический процесс W, который клонирует квантовые состояния. Чтобы от него была хоть какая-то польза, он должен действовать на все состояния в гильбертовом пространстве, то есть иметь вид функции $W: H \bigotimes H \to H \bigotimes H$, такой, что $W(|\Psi, 0\rangle = \lambda|\Psi, \Psi\rangle$ для любого состояния $|\Psi\rangle$, где константа C зависит от Ψ. Эта функция не должна быть вероятностной, так как мы рассматриваем чистые состояния. Значит, W должен быть унитарным оператором. Но тогда у нас в силу линейности W получилось бы $\lambda|\Psi, \Psi\rangle + \mu|\Psi_1, \Psi_1\rangle = W|\Psi, 0\rangle + W|\Psi_1, 0\rangle = W|\Psi + \Psi_1, 0\rangle = \nu|\Psi + \Psi_1,\ \Psi + \Psi_1\rangle = \nu(|\Psi, \Psi\rangle + |\Psi_1, \Psi_1\rangle + |\Psi, \Psi_1\rangle + |\Psi_1, \Psi\rangle)$, для любой пары состояний, что, разумеется неверно. Итак, клонирование квантовых состояний невозможно.

Но тогда, быть может, мы могли бы использовать естественное «псевдоклонирование» с помощью CNOT и анциллы $CNOT\ (\lambda|0\rangle + \mu|1\rangle) \bigotimes 0\rangle = \lambda|0, 0\rangle + \mu|1, 1\rangle$? При этом, конечно, мы не будем иметь в результате клонированного состояния исходного кубита $(\lambda|0\rangle + \mu|1\rangle) \bigotimes (\lambda|0\rangle + \mu|1\rangle)$ (убедитесь в этом сами, используя дистрибутивность тензорного произве-

дения). Однако в каком-то смысле наш исходный кубит окажется закодированным в два новых. Далее, можно повторить эту процедуру со следующим вспомогательным кубитом, получив состояние $\lambda|0,0,0\rangle + \mu|1,1,1\rangle$. Такая процедура в случае классического состояния кубита 0 или 1, действительно приводит к клонированию. Однако пользы от этой кодировки в случае глобальных ошибок будет не много, как следует из рассмотренного выше случая измерения одного кубита. Этот пример также иллюстрирует запрет на клонирование квантовых состояний, так как при попытке «клонировать» такое состояние новые «копии» окажутся в запутанном состоянии с «оригиналами» и наблюдение «оригиналов» неизбежно разрушит «копии». Для коррекции такого воздействия надо применять немного более сложный прием, который мы здесь опишем для простейшей ситуации.

Фактически два выделенных типа ошибок (локальные и наблюдения единичных кубитов) исчерпывают все возможные типы ошибок вообще. Рассмотрим, например, нарушение фазы $|0\rangle \to |0\rangle$, $|1\rangle \to -|1\rangle$ в первом кубите. Тогда преобразование Адамара приведет к тому же самому, что и инверсия содержимого этого кубита. Если мы скорректировали ошибку в содержимом этого кубита, то следующее применение преобразования Адамара восстановит нам прежнее состояние. Рассмотрим теперь такое воздействие окружения, которое можно представить в виде $U : \alpha \bigotimes \xi \to \chi$, где α — состояние окружения и U действует на α и на первый кубит в нашей системе. На первый взгляд, этот тип ошибок более общий. Однако его можно свести к комбинации измерения одного кубита и локальной ошибки.

Рассмотрим еще раз схему коррекции локальных ошибок. Мы закодируем наше квантовое состояние с использованием некоторого числа анцилл и устроим специальную анциллу, играющую роль «мусорного ящика». После того как произошла ошибка, мы с помощью стандартных унитарных преобразований перемещаем содержимое затронутых ошибкой кубитов в этот «мусорный ящик», так что первоначальное состояние испорченных кубитов восстанавливается и только «мусорный ящик» хранит информацию о том, какая ошибка произошла.

Эта схема будет работать и в случае глобальных ошибок. Пусть интенсивность локальных воздействий окружения на нашу квантовую систему ограничена. Мы переведем исходное состояние в соответствующее ему закодированное состояние системы с анциллами и можем использовать процедуру коррекции снова и снова через короткий интервал времени Δ, так что вероятность того, что в течение этого времени окружение будет воздействовать более чем на один кубит, будет исчезающе малой. Так, варьируя Δ, мы можем сколь угодно долго поддерживать нашу систему в первоначально закодированном состоянии. Конечно, процедура коррекции должна

зависеть от метода кодировки, и мы сначала опишем этот метод в применении к состоянию одного кубита ξ. В случае нескольких кубитов мы можем просто закодировать каждый кубит по отдельности и выполнить нашу процедуру коррекции над всеми кодирующими ансамблями одновременно и независимо. Наша процедура коррекции восстановит закодированное состояние и сохранит запутанность, так что ее одновременное выполнение для всех кодирующих ансамблей сохранит закодированный вид первоначального ансамбля.

Итак, сконцентрируемся на методе кодировки состояния одного кубита $\xi = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Этот кубит будет кодироваться тремя кубитами так, что если один из них будет измерен (мы не знаем какой), то наша процедура, проведенная над результатом измерения, восстановит исходное закодированное состояние. Кодирование будет линейной операцией, так что достаточно определить его для базисных состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Их коды будут, соответственно, таковы:

$$\begin{aligned}\tilde{0} &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(|000\rangle + |100\rangle + |010\rangle + |001\rangle + |110\rangle + |101\rangle + |011\rangle + |111\rangle),\\ \tilde{1} &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(|000\rangle - |100\rangle - |010\rangle - |001\rangle + |110\rangle + |101\rangle + |011\rangle - |111\rangle).\end{aligned} \tag{22}$$

Таким образом, код состояния ξ будет трехкубитовым состоянием вида $\tilde{\xi} = \alpha\tilde{0} + \beta\tilde{1}$. Теперь посмотрим, что произойдет, если мы понаблюдаем один из кубитов. У нас есть три кубита, два состояния, кодирующих базисные однокубитовые состояния ($\tilde{0}$, $\tilde{1}$) и два различных результата наблюдения (0 или 1). То есть существует 12 различных результатов измерения наших двух кодирующих состояний, если произошло измерение одного кубита, плюс 2 неизмененных базисных состояния, если вообще не произошло никаких измерений. Обозначим результаты через $\tilde{i}_k^j$, $i = 0, 1$, $j = \emptyset, 1, 2, 3$, $k = \emptyset, 0, 1$, что означает «состояние, полученное при измерении j-го кубита состояния $\tilde{i}$, если k — результат этого измерения». Если измерений вообще не было, то $j = k = \emptyset$ и $\tilde{i}_k^j = \tilde{i}$. Во всех случаях происходящего измерения результирующее состояние будет иметь вид:

$$\begin{aligned}\tilde{0}_0^1 &= \frac{1}{2}(|000\rangle + |010\rangle + |001\rangle + |011\rangle,\\ \tilde{0}_1^1 &= \frac{1}{2}(|100\rangle + |110\rangle + |101\rangle + |111\rangle,\\ \tilde{0}_0^2 &= \frac{1}{2}(|000\rangle + |100\rangle + |001\rangle + |101\rangle,\\ \tilde{0}_1^2 &= \frac{1}{2}(|010\rangle + |110\rangle + |011\rangle + |111\rangle,\end{aligned} \tag{23}$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{0}_0^3 &= \frac{1}{2}(|000\rangle + |010\rangle + |100\rangle + |110\rangle,\\
\tilde{0}_1^3 &= \frac{1}{2}(|001\rangle + |011\rangle + |001\rangle + |101\rangle,\\
\tilde{1}_0^1 &= \frac{1}{2}(|000\rangle - |010\rangle - |001\rangle + |011\rangle,\\
\tilde{1}_1^1 &= \frac{1}{2}(-|100\rangle + |110\rangle + |101\rangle - |111\rangle,\\
\tilde{1}_0^2 &= \frac{1}{2}(|000\rangle - |100\rangle - |001\rangle + |101\rangle,\\
\tilde{1}_1^2 &= \frac{1}{2}(-|010\rangle + |110\rangle + |011\rangle - |111\rangle,\\
\tilde{1}_0^3 &= \frac{1}{2}(|000\rangle - |010\rangle - |100\rangle + |110\rangle,\\
\tilde{1}_1^3 &= \frac{1}{2}(-|001\rangle + |011\rangle - |001\rangle + |101\rangle.
\end{aligned}
\tag{23}
$$

Определим теперь действие корректирующего оператора на данных векторах как

$$
U_{rest}:\ \tilde{i}_k^j \bigotimes \tilde{0} \to \tilde{i} \bigotimes \tilde{0}_k^j. \tag{24}
$$

Убедимся, что так определенный корректирующий оператор сохраняет все углы между векторами i_k^j. Обозначим подпространства, порожденные всеми векторами видов $\tilde{0}_k^j$ и $\tilde{1}_k^j$, через O и I соответственно. Мы имеем: $\tilde{0} \perp \tilde{1}$, $O \perp I$, все другие углы будут равны $\frac{\pi}{3}$, поскольку $\langle \tilde{1}_0^1 | \tilde{1}_0^2 \rangle = \langle \tilde{1}_0^1 | \tilde{1}_1^2 \rangle = \frac{1}{2}$, и то же самое имеет место для базиса подпространства O. Мы видим, что все углы сохраняются. Значит, оператор U_{rest} может быть продолжен до унитарного оператора на всем пространстве шести кубитов $C^8 \bigotimes C^8$, который мы будем обозначать той же буквой. Отметим, что его действие было нами определено лишь для состояний с нулевыми анциллами. Это означает, что мы должны после каждого применения этого оператора U_{rest} позаботиться о восстановлении нулевого состояния анцилл, необходимого для правильного действия следующего корректирующего оператора. Это можно сделать, измеряя анциллы и затем помещая в них нуль (что не является унитарным оператором). Обозначим эту процедуру через A_{rest}. Тогда полный цикл «декогеренция–восстановление» принимает форму

$$
\alpha\tilde{0} + \beta\tilde{1} \overset{\text{observation}}{\to} \alpha\tilde{0}_k^j + \beta\tilde{1}_k^j \overset{U_{rest}}{\to} (\alpha\tilde{0} + \beta\tilde{1}) \bigotimes \tilde{0}_k^j \overset{A_{rest}}{\to} \alpha\tilde{0} + \beta\tilde{1}\ , \tag{25}
$$

где мы опускаем нулевые анциллы в записи тензорного произведения. Отметим, что наше унитарное корректирующее преобразование никак не за-

висит от того, какая произошла ошибка, — его роль состоит только в том, чтобы переместить ошибку, если таковая имеется вообще, в «мусорную корзину», образованную анциллами, и очистить тем самым исходное закодированное состояние, которое никак не изменится при измерении и обновлении анцилл, поскольку оно выделяется в виде тензорного сомножителя. Пусть δ_{rest} обозначает время, требуемое для этой последовательности операторов, а Δ — интервал, с которым мы совершаем операции коррекции. Предположим, что интенсивность внешнего воздействия не слишком велика, так что вероятность измерения более одного кубита из наших трех за время Δ пренебрежимо мала по сравнению с вероятностью измерения ровно одного, а анциллы мы постоянным измерением вообще поддерживаем в нулевом состоянии всегда, кроме промежутков δ_{res}. Кроме того, пусть вероятность ошибки в любом кубите за время δ_{rest} также пренебрежимо мала. Тогда описанная итерация оператора коррекции с большой вероятностью будет поддерживать наше закодированное состояние одного кубита несмотря на декогерентность. Для сохранения многокубитовых состояний достаточно применять эту закодировать все кубиты по отдельности и применять описанную процедуру коррекции к каждому кодирующему шестикубитовому ансамблю по отдельности.

Литература

[1] Adenier G., Khrennikov A. Yu. Is the fair sampling assumption supported by EPR Experiments? // J. Phys. B, 2007, vol. 40, no. 1, 131–141.

[2] Akulin V. et al. Description of quantum entanglement with nilpotent polynomials: extensive characterization of entanglement and canonical forms // Proceedings of SPIE, 2006, vol. 6264, 02–1 — 02–11.

[3] Akulin V. et al. Quantum computers and computing, 2006, vol. 6, no. 1, 107–125.

[4] Aho V., Hopcroft J.E., and Ullman J.D. The design and analysis of computer algorithms. Addison–Wesley, 1974.

[5] Arakelov K. and Ozhigov Y. Association of two-atom molecules. Simulation via Quantum state selection, accepted for publication on Vestnik of MGU, Computational mathematics and cybernetics, issue 2009.

[6] Aspect A., Grangier P., and Roger G. Experimental realization of Einstein–Podolsky–Rosen–Bohm Gedankenexperiment: A new violation of Bell's inequalities // Phys. Rev. Lett., 1982, vol. 49, Iss. 2, 91–94.

[7] Benioff P. Quantum mechanical hamiltonian models of Turing machines // J. Stat. Phys., 1982, vol. 29, 515–546.

[8] Bennett C. H., Bernstein E., Brassard G., and Vazirani U. V. Strengths and weaknesses of quantum computing // SIAM J. Computing, 1997, vol. 26, no. 5, 1510–1523.

[9] Birkhoff G. and von Neumann J. The logic of quantum mechanics // Ann. of Math., 1936, vol. 37, 823–843.

[10] Bennett C. H., Brassard G., Crepeau C., and Maurer U. M. Generalized privacy amplification // IEEE Trans. Inform. Theory, 1995, vol. 41, 1915.

[11] Blatt R. et al. Ion trap quantum computing with Ca+ ions // Quantum Information Processing, 2004, vol. 3, no. 1–5, 61–73.

[12] Blohintsev D. V. Principal topics of quantum theory. Moscow: Nauka, 1977.

[13] Boyer M., Brassard G., Hyer P., and Tapp A. Tight bounds on quantum searching // Proc. 4th Workshop on Physics and Computation, 1996, 36–43.

[14] Bravyi S. B. and Kitaev A. Yu. Fermionic quantum computation // Ann. Phys., 2002, vol. 298, no. 1, 210–226.

[15] Brouer L. E. J. Intuitionism and formalism// Amer. Math. Soc. Bull., 1913, vol. 20, 81–96.

[16] Durr C. and Hoyer P. A quantum algorithm for finding the minimum // Proc. Roy. Soc. Lond. A, 1999, vol. 455, 2165–2172.

[17] Feynman R. The theory of fundamental processes. Caltex, W.A.Benjamin, Inc., NY, 1961.

[18] Feynman R. Simulating physics with computers // J. Theoret. Phys., 1982, vol. 21, 467–488.

[19] Feynman R. and Hibbs D. Quantum mechanics and path integrals. Moscow: Nauka, 1984.

[20] Genovese M. Research on hidden variable theories: A review of recent progress // Phys. Rep., 2005, vol. 413, 319–396.

[21] Grover L. A fast quantum mechanical algorithm for database search // Proceedings of 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC), May 1996, pages 212–219; Proceedings, Melville, NY, 2006, vol. 810; electronic version: xxx.lanl.gov, quant-ph/0610052.

[22] Horne M. A. and Zeilinger A. Speakable and unspeakable in quantum mechanics: Invited book review // Amer. J. Phys., 1989, vol. 42, 630.

[23] Khrennikov A. Prequantum classical statistical field theory: Complex representation, Hamilton–Schrödinger equation, and interpretation of stationary states // Foundations of Physics Letters, vol. 19, no. 4, 299–319.

[24] Kleene S. C. and Vesley R. E. The foundations of intuitionistic mathematics: Especially in relation to recursive functions. Amsterdam, 1965.

[25] Knuth D. E. The art of computer programming. Addison–Wesley, 1997.

[26] Kurakin P., Malinetskii G., and Bloom H. Dialogue model of quantum dynamics / Yu. Ozhigov (Ed.) // Proceedings of SPIE, Quantum Informatics, 2005, vol. 6264.

[27] Markov A. A. About the continuity of constructive functions // Uspehi Mat. Nauk, 1954, vol. 9, №3 (61), 226–229.

[28] Ozhigov Yu. I. and Ozhigov A. Yu. Algorithmic container for physics // AIP Conference Proceedings, vol. 962 (Quantum Theory, Reconsideration of Foundations) pp. 168–174.

[29] Ozhigov Yu. I. Amplitude quanta in multi particle system simulation // Russian Microelectronics, 2006, vol. 35, no. 1, 53–65.

[30] Ozhigov Yu. I. Lower bounds of a quantum search for an extreme point // Proc. Roy. Soc. Lond. A, 1999, vol. 455, 2165–2172.

[31] Ozhigov Yu. I. Quantum computers speed up classical with probability zero // Chaos Solitons Fractals, 1999, vol. 10, 1707–1714.

[32] Ozhigov Yu. I. How behavior of systems with sparse spectrum can be predicted on a quantum computer // Pis'ma v JETP, vol. 76, 11, 799–804.

[33] Ozhigov Yu. I. Dynamical diffusion as the approximation of one quantum particle dynamics, e-print, quant-ph/0702237.

[34] Ozhigov Yu. I. Quantum recognition of eigenvalues, structure of devices and thermodynamic properties // ZhETF, 2003, vol. 123, iss. 2, 384–398.

[35] Ozhigov Yu. I. Easy control on fermionic quantum computations // NATO Science Series, 2005, vol. 189, 27–32.

[36] Ozhigov A., Arakelov K., and Ozhigov Yu. Principles of the numerical simulation of many body quantum dynamics // Quantum Computers and Computing, 2006, vol. 6, no. 1, 137–148.

[37] Ozhigov Yu. and Fedichkin L. Quantum computer with fixed interaction is universal // JETP Lett., 2003, vol. 77, 328–330.

[38] Penrose R. The road to the reality. New York, 2006.

[39] Shenfield J. Mathematical Logic. Moscow: Nauka, 1975.

[40] Shor P. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer // SIAM J. Sci. Statist. Comput., 1997, vol. 26, 1484–1512.

[41] Andrade J. L., Silva E., and Loshak J. Fields, particles, quanta. Moscow: Nauka, 1972.

[42] Tseitin G. S. Algorithmic operators in the constructive metric spaces // Dokl. Akad. Nauk USSR, 1959, vol. 128, №1, 49–52.

[43] Wheeler J. A. and Zurek W. H. Quantum theory and measurement // Princeton, 1983.

[44] Wolfram S. Twenty problems in the theory of cellular automata // Phys. Scripta, 1985, vol. 9, 170–183.

[45] Zalka C. Grover's quantum searching algorithm is optimal // Phys. Rev. A, 1999, vol. 60, 2746–2751.

[46] Zarnitsyna V., Huang J., Zhang F., Chien Y., Leckband D., and Zhu C. Memory in receptor ligand-mediated cell adhesion // Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 2007, Nov 8.

[47] Zurek W. Probabilities from entanglement, Born's rule from invariance // Phys. Rev. A, 2005, vol. 71, 052105.

[48] Боголюбов Н., Ширков Б. Введение в теорию квантованных полей. М.: Наука, 1974.

[49] Валиев К. А. Квантовые компьютеры: смена парадигмы вычислений // Вестн. МГУ, сер. 15. Вычислит. матем. и киберн., 2005, № 2, 3–16.

[50] Валиев К. А. Квантовые компьютеры и квантовые вычисления // УФН, 2005, т. 175, № 1, 3–39.

[51] Валиев К. А., Кокин А. А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. М.–Ижевск: РХД, 2000.

[52] Витаньи П., Ли М. Колмогоровская сложность: двадцать лет спустя // УМН, 1988, т. 43, № 6(264), 129–166.

[53] Владимиров В. С. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1981.

[54] Дирак П. Математические основы теории относительности. М.: Мир, 1982.

[55] Дубовик В. М., частное сообщение.

[56] Кудря В. П., частное сообщение.

[57] Кушнер Б. А. Лекции по конструктивному математическому анализу. М.: Наука, 1973.

[58] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика: Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974.

[59] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика. М.: Наука, 1988.

[60] Мальцев А. Н. Алгоритмы и рекурсивные функции. М.: Наука, 1986.

[61] Менский М. Б. Концепция сознания в контексте квантовой механики // УФН, 2005, т. 175, 413.

[62] Молотков С. Н. Квантовая криптография и теоремы В. А. Котельникова об одноразовых ключах и об отсчетах // УФН, 2006, т. 176, вып. 7, 777–788.

[63] Новиков П. С. Конструктивная математическая логика с точки зрения классической. М.: Наука, 1977.

[64] Новосадов Б. К. Методы решения уравнений квантовой химии: Основы теории молекулярных орбиталей. М.: Наука, 1988.

[65] Ожигов Ю. И. Квантовые вычисления: Учебн. пособ. М.: МГУ, 2003.

[66] Роджерс Д. Алгоритмы и рекурсивные функции. М.: Мир, 1970.

[67] Тихонов А. Н. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1986. (См. также: ДАН СССР, 1963, т. 151, №3, с. 501–504.)

[68] Темам Р. Уравнение Навье–Стокса: Теория и численный анализ. М.: Мир, 1981.

[69] Успенский В. А. Что такое нестандартный анализ? М.: Наука, 1987.

[70] Успенский В. А. Лекции о вычислимых функциях. М.: Наука, 1960.

[71] Хренников А. Ю. Квантовая теория информации. М.: Физматлит, 2008.

КРИЯ: Пробуждение к осознанию десяти тел

Десять тел:

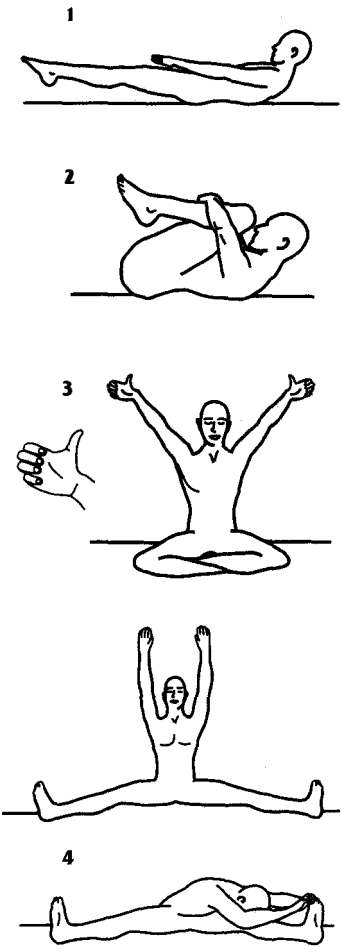
Тело души
Негативное ментальное тело
Позитивное ментальное тело
Нейтральное ментальное тело
Физическое тело
Тело нимба
Тело ауры
Праническое тело
Легкое тело[1]
Лучистое тело[2]

1. Поза растяжения. Лягте на спину, руки вдоль тела. Голову и ноги приподнимите от пола на ***15 см***; руки вытянуты над телом и тянутся к носкам. Ладони повернуты друг к другу. Носки оттянуты, взгляд направлен на пальцы ног. Дышите дыханием огня[3]. ***1—3 минуты***.

2. Колени к носу. Подняв голову, подтяните колени к груди, обхватите руками. Подтяните их как можно ближе к голове, так чтобы нос оказался между коленями. В этом положении дышите дыханием огня. ***1—3 минуты***.

3. Терминатор эго. Сядьте в ***Позу целомудрия*** или в ***Простую позу (сукхасана)***[4]. Поднимите руки вверх, так чтобы между ними образовался угол ***60 градусов***. Согните пальцы (подушечки пальцев прижимаются к подушечкам ладоней под пальцами). Большие пальцы рук направлены вверх. Закройте глаза. Сконцентрируйте внимание над головой. Дышите дыханием огня. ***1—3 минуты***. Для завершения упражнения сделайте вдох и одновременно соедините над головой кончики больших пальцев. Сделайте выдох, выполнив мулабандху (корневой замок)[5]. Затем снова сделайте вдох и расслабьтесь.

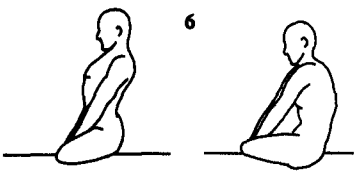
4. Растяжение «жизненного нерва»[6]. Сядьте, широко разведите ноги в стороны, колени выпрямлены. Поднимите руки над головой и сделайте вдох. Затем, делая выдох, потянувшись, наклонитесь к левой ноге, возьмитесь за пальцы. Сделайте вдох: на вдохе вернитесь в исходное положение. Затем, делая выдох, так же наклонитесь к правой ноге, возьмитесь за пальцы. Время выполнения упраж-



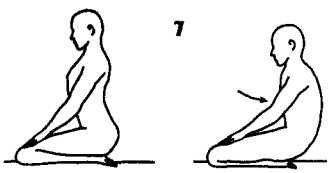
[1] Легкое тело — в оригинале Subtle Body; в некоторых переводах Тонкое тело.
[2] Лучистое тело — в оригинале Radiant Body; в некоторых переводах Сияющее тело.
[3] См. Приложение 1. Дыхание.
[4] Поза целомудрия — положение сидя между ног на полу, ступни лежат на полу.
Простая поза (сукхасана) — положение сидя, спина прямая; вариант: ступни скрестно лежат на полу.
[5] См. Приложение 1. Мышечные замки (бандхи).
[6] Жизненный нерв — седалищный нерв со всеми ответвлениями.
[7] Здесь и далее: во всех динамических упражнениях дается время выполне-

5

6



7



8

9

[1] Положение сидя на пятках, колени вместе, спина прямая, ладони лежат на коленях называется Поза камня.

[2] Замок Венеры: сплетите пальцы рук (у женщин верхним должен оказаться правый мизинец, у мужчин — левый), слегка разведите в стороны основания ладоней. В женском замке внешняя сторона большого пальца правой руки соприкасается с внутренней стороной левого, кончик правого большого пальца мягко упирается в лунку между большим и указательным пальцами левой руки. В мужском варианте — наоборот.

5. Растяжение «жизненного нерва». Продолжайте сидеть с разведенными ногами. Начните упражнение с выдоха. На выдохе наклонитесь вперед с прямой спиной; тянитесь макушкой вперед; возьмитесь за пальцы обеих ног, коснитесь лбом пола. На вдохе вернитесь в исходное положение. Выполнять упражнение ***1—3 минуты***.

6. Прогибание позвоночника (Езда на верблюде). Сядьте в ***Простую позу***. Обеими руками возьмитесь за лодыжки. Затем сделайте вдох: на вдохе прогнитесь, перенеся вес на переднюю часть ягодиц. Затем сделайте выдох: на выдохе округлите спину и перенесите вес на заднюю часть ягодиц. Голова остается неподвижна, руки лежат на коленях, локти выпрямлены, но не напряжены. Выполнять упражнение ***1—3 минуты***.

7. Прогибание позвоночника (Езда на верблюде). Сядьте на пятки, колени вместе[1]. Ладони положите на колени. На вдохе прогнитесь вперед, на выдохе — назад. Сфокусируйте внимание в Точке третьего глаза. Выполнять упражнение ***1—3 минуты***.

8. Скручивание позвоночника. Сидя на пятках, возьмите себя руками за плечи сверху, так чтобы большие пальцы оказались со стороны спины. Сделайте вдох и на вдохе повернитесь влево. На выдохе повернитесь вправо. Продолжайте, следите за тем, куда направлены вдох и выдох. Не опускайте локти. Руки от плеч до локтей параллельны полу на протяжении всего упражнения. ***1—3 минуты***.

9. Возьмите себя за плечи, как описано в предыдущем упражнении. Сделайте вдох и на вдохе, не отнимая пальцев от плеч, поднимайте локти до тех пор, пока запястья не соединятся за головой. Сделайте выдох: на выдохе опустите локти до уровня плеч, затем повторите. ***1—3 минуты***.

10. Молот. Сложите пальцы в замок Венеры[2]. Руки положите на колени, локти выпрямлены. На вдохе вытяните руки над головой, не сгибая локтей. На выдохе опустите руки обратно на колени. Руки прямые на протяжении всего упражнения. ***1—3 минуты***.

11. Попеременное поднимание плеч. Сядьте в ***Простую позу***. Руки свободно лежат на коленях. На вдохе поднимите левое плечо вверх, одновременно опуская правое. На выдохе поднимите вверх правое плечо, одновре-

менно опуская левое. Повторяйте движения ***1 минуту***. Затем измените порядок: на вдохе поднимайте правое плечо, на выдохе левое. Выполняйте ***1 минуту***.

12. Одновременное поднимание плеч. На вдохе поднимите оба плеча. На выдохе опустите. ***1 минута***.

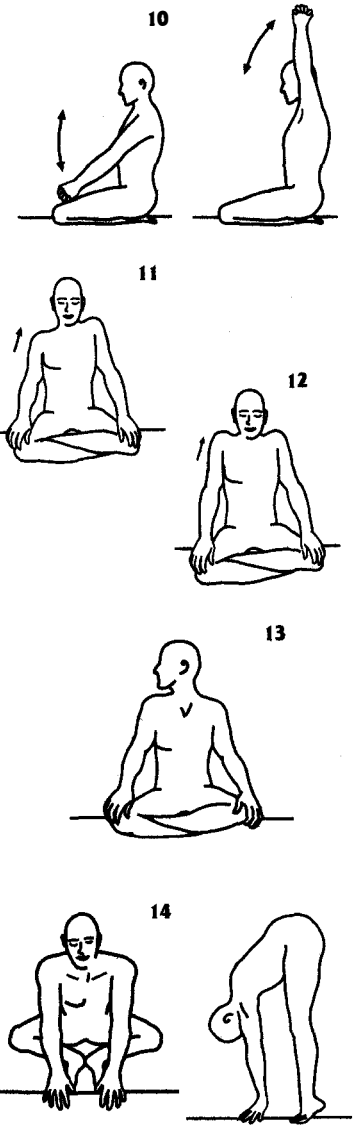
13. Повороты головы. Оставайтесь в ***Простой позе***; руки на коленях: на вдохе поверните голову влево, на выдохе вправо. Делайте это единым движением, как будто говорите «нет». Повторяйте ***1 минуту***. Затем смените направление, чтобы на вдохе голова двигалась вправо, на выдохе — влево. Выполняйте ***1 минуту***. В завершение сделайте глубокий вдох и сконцентрируйте внимание в Точке третьего глаза. Затем сделайте медленный выдох.

14. Поза лягушки[1]. Сядьте на корточки; носки врозь, пятки вместе и не касаются пола. Руки опущены между коленей, пальцы лежат на полу. Смотрите прямо перед собой. В этом положении сделайте вдох: на вдохе, не отрывая рук от пола, выпрямите ноги, стремясь лбом к коленям. Пятки по-прежнему соединены и не касаются пола. Мышцы шеи расслаблены. Затем сделайте выдох: на выдохе вернитесь в исходное положение; голову поднимите. Дыхание глубокое, энергичное. Повторите упражнение ***54 раза***.

15. *Лягте на спину и полностью расслабьтесь.*

16. Медитация из лайа-йоги. Сядьте в ***Простую позу***; руки на колени. Пальцы сложите в гиян-мудру[2] (большой палец касается подушечки указательного того же руки). Начните читать мантру: «Эк Онг Кар-а Са Та На Ма-а Сири Ва-а-Хей Гуру»[3]. На «Эк» втягивайте пупок. Каждое «-а» происходит скорее от движения диафрагмы, когда энергично подтягиваются все диафрагмальные мышцы, нежели произносится голосом. На «-Хей Гуру» расслабляйте пупок и диафрагму. Техническая часть медитации строится на концепции ***3½ оборота*** кундалини. Потому добавьте визуализацию: представляйте себе, как звук мантры выходит у вас из основания позвоночника и ***3½ раза*** оборачивается вокруг позвоночника, доходя до макушки. ***11—31 минута***.

Комплекс упражнений взят из книги «Человеческое тело.



[1] Некоторые позы в кундалини-йоге школы Йоги Бхаджана не имеют аналогии в традиционной йоге (например, в хатха-йоге). Поза лягушки относится к их числу. Она представляет собой не столько позу, сколько упражнение, напоминающее лягушачьи прыжки.

[2] Мудра — положение рук и пальцев; редко: положение тела.

[3] Подробно о произнесении мантры

ноги на ***15 см***. Руки подняты перпендикулярно полу ладонями друг к другу. Сделайте выдох и на выдохе опустите ноги на пол, одновременно поднимая голову, так чтобы подбородок прижался к груди. Продолжайте чередовать подъемы головы и ног ***3 минуты***, дыхание медленное и глубокое. Лягте на пол и расслабьтесь на ***2 минуты***.
Упражнение полезно для Сердечного центра.

11

11. Вращение головой. Сядьте в ***Простую позу***. Сложите на груди руки, держась за локти. Начните медленно выписывать головой восьмерку в течение ***30 секунд*** в одном направлении, затем еще ***30 секунд*** — в обратном. Потом сделайте глубокий вдох и наклонитесь вперед, так чтобы коснуться лбом пола. Сделайте выдох и как можно быстрее выпрямитесь. Повторите ***10 раз***.
Упражнение полезно для Сердечного центра.

12

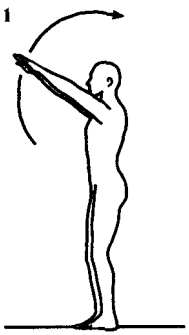
12. Медитируйте и читайте мантру: «Бог и я, я и Бог — мы одно».

КОММЕНТАРИЙ

Приведенный здесь комплекс упражнений стимулирует Сердечный центр и направлен на восстановление нервной системы. Ваше ощущение счастья, благополучия и связи с миром зависит от сбалансированности вашего индивидуального биоэнергетического поля. Если поле сильное, мышцы подчиняются сигналам мозга, так как нервы обеспечивают хорошую связь между мышцами и мозгом. Состояние нервной системы зависит от минерального и гормонального баланса крови. Приведенный здесь набор упражнений помогает восстановить правильный состав крови. Наилучших результатов добиваются те, кто учится выполнять упражнения с максимальной точностью. Если поначалу вам не хватает выносливости, чтобы делать их столько, сколько требует инструкция, то делайте сколько можете, увеличивая продолжительность постепенно. Освоив технику, начните осваивать медитацию, добиваясь контроля над мыслями, и выполняйте комплекс в течение 40 дней.

Комплекс упражнений взят из книги «Руководство к садхане».

1

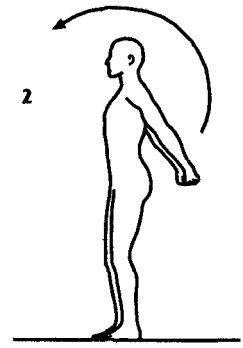


КРИЯ: Новые легкие и система кровообращения

1. Вращение руками назад. Встаньте прямо; вес тела равномерно распределен на обе ступни. Руки выпрямлены и не сгибаются в локтях до конца упражнения. Сложите пальцы в буддхи-мудру (кончик мизинца соприкасается с кончиком большого пальца, остальные пальцы выпрямлены и не напряжены). Опишите руками большой круг назад: выпрямите руки перед собой, затем поднимите вверх, отведите назад, вниз и снизу поднимите вверх прямо перед собой. Продолжайте вращать руками, описывая от плеч

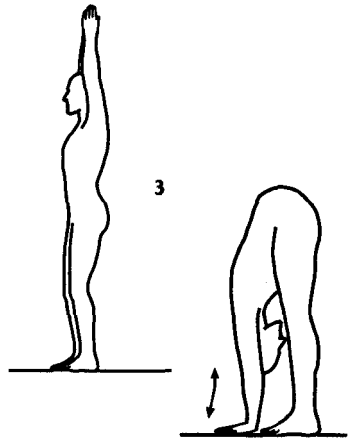
большие круги, свободно и энергично. Сосредоточьтесь и постарайтесь делать упражнение с полной отдачей. Движения плавные и непрерывные. Продолжайте ***5 минут***. Затем сделайте вдох и ненадолго вытяните руки вверх. Выдохните и расслабьтесь.

Упражнение стимулирует легочные меридианы и прочищает верхние отделы лимфосистемы.



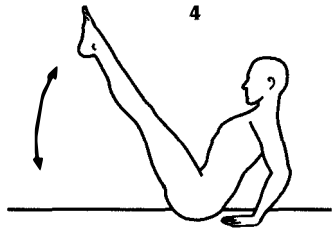
2. Вращение руками вперед. Исходное положение как в предыдущем упражнении. Сожмите руки в кулаки, большие пальцы спрятаны в кулак. Опишите руками круг в противоположном направлении: вниз, назад вверх и вперед, в исходное положение. Локти выпрямлены, движения энергичные. Продолжайте ***1—2 минуты***. Затем сделайте вдох и вытяните руки перед собой параллельно полу. Сделайте выдох и расслабьтесь.

Упражнение уравновешивает эффект от упражнения 1, а также стимулирует циркуляцию крови в кровеносных сосудах шеи и шек.



3. Пружина. Наклоны вперед. Встаньте прямо. Поднимите руки над головой; локти выпрямлены. Наклонитесь вперед и положите обе ладони на пол. Раскачиваясь в пояснице и пружиня всем корпусом, ударяйте ладонями о пол; ***7 раз***. На каждый удар произносите «Хар!». Затем распрямитесь, хлопните в ладоши над головой и произнесите «Хари!»[1]. Выполняйте всю последовательность действий ритмично, чтобы мантра «Хар Хар Хар Хар Хар Хар Хар Хари!» звучала непрерывно. Продолжайте ***6—7 минут***. Затем сделайте вдох — выпрямите спину, выдохните и расслабьтесь.

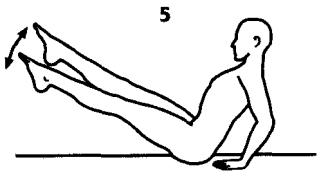
Упражнение стимулирует пупочную чакру. При этом высвобождается резервная энергия, которая лечит весь организм, координируя его работу, а также улучшая кровообращение в областях, отвечающих за пищеварение. Мантра здесь играет роль триггера, открывающего выход энергии, скопившейся в Пупочном центре. Упражнение также освобождает от эмоций, таких как страх и смятение, блокирующих способность к действиям.



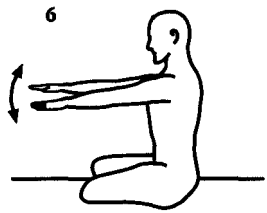
4. Поднимание ног совместно с дыханием огня. Сядьте на пол, вытяните ноги вперед; ступни вместе. Положите ладони на пол рядом с собой. Энергичным движением поднимите ноги на ***60 градусов*** к полу, затем опустите обратно. Одновременно начните дышать дыханием огня. Дышите энергично. Движения и дыхание должны быть скоординированы следующим образом: вдох-выдох — поднимите ноги, вдох-выдох — опустите. ***2 минуты***.

[1] См. Приложение I. Мантры

Упражнение улучшает кровообращение в подпупочной области и в нижней части ног, а также стимулирует работу толстой кишки.

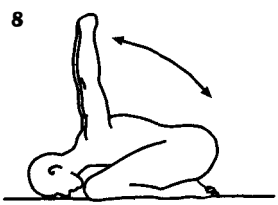


5. «Ножницы» совместно с дыханием огня. Сядьте на пол, вытяните вперед ноги. Положите ладони на пол рядом с собой. Поднимите ноги на ***45 см***. Делайте ногами движение «ножницы». Разводите их в стороны, образуя угол ***45 градусов***. В такт подключите дыхание огня. Дыхание энергичное. Продолжайте ***2—3 минуты***, затем сделайте глубокий вдох и ненадолго сведите ноги вместе, на выдохе расслабьтесь и опустите ноги.
Усиливает эффект упражнения 4, плюс балансирует биоэнергетическое поле, а также замечательно подходит для укрепления репродуктивных органов.



6. «Ножницы» руками совместно с дыханием огня. Сядьте в ***Простую позу***. Вытяните руки прямо перед собой параллельно полу ладонями вниз. Начните делать движение «ножницы». Чередуйте руки — какая верхняя, какая нижняя. Подключите дыхание огня, согласовывая его с движениями рук. Расстояние между руками не превышает ширины плеч. Дыхание энергичное. Продолжайте ***30—60 секунд***. В завершение вытяните руки перед собой, задержитесь в этом положении и сделайте вдох. Выдох — и расслабьтесь.
Упражнение обновляет легкие, а также синхронизирует ритм биоэнергетического поля сердца с ритмом дыхания.

7. Поза эмбриона совместно с дыханием огня. Сядьте на пятки и наклонитесь вперед, коснувшись лбом пола. Руки положите на пол рядом с собой ладонями вверх. Сконцентрируйте внимание на Точке межбровья. Дышите дыханием огня. ***30—60 секунд***.
Упражнение вызывает приток крови к головному мозгу, глазам и верхним железам внутренней секреции.



8. Движение рук в йога-мудре совместно с дыханием огня. Останьтесь в прежней позе. Руки соедините за спиной: пальцы сплетите в замок «молот»[1], скрестив большие пальцы, тем самым усиливая замок. Поднимите руки вверх, затем опустите. Выполняйте движения ритмично в быстром темпе. Дышите дыханием огня следующим образом: вдох-выдох — руки идут вверх, вдох-выдох — руки опускаются вниз. ***2 минуты***. Затем сделайте глубокий вдох, поднимите руки вверх, ненадолго задержите дыхание, выдохните и расслабьтесь.
Упражнение воздействует на верхние доли легких и усиливает биоэнергетическое поле.

[1] Замок «молот»: сплетите пальцы рук и сожмите ладони. Большие пальцы, в отличие от замка Венеры, скрещены. Название замка «молот» родилось из сравнения: сложенные таким образом руки могли бы произвести сильный удар, как молотком.

9. Медитация. Сядьте в ***Простую позу***. Войдите в медитативное состояние. Спина прямая, грудь приподнята; копчик подтянут. Мысленно поднимитесь к Бесконечному, Беспредельному и Безбрежному. Откройте ему свое сердце и искренне попросите, чтобы вам были ниспосланы исцеление, силы и осознание. Осознанно вложите в просьбу сердце и душу. Время медитации — ***2—3 минуты***.

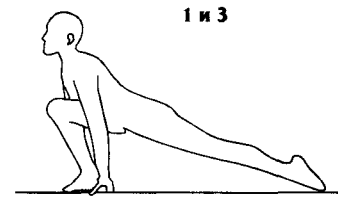
10. Полностью расслабьтесь.

КОММЕНТАРИЙ

*Когда дыхательные пути и система кровообращения находятся в хорошей форме, человек чувствует себя полным сил и владеет собой. Дыхание, его поток внутри тела определяет также ваше эмоциональное состояние. Приведенный здесь комплекс упражнений помогает восстановить работу легких и улучшает циркуляцию крови по всему телу. Эта короткая динамичная крия предназначена для учеников среднего уровня, а также для активных учеников начального уровня, находящихся в хорошей физической форме. Ежедневно практикуя эту крию **22 минуты**, вы восстановите свой организм, одновременно подготавливая легкие для практики пранаямы кундалини-йоги.*

Комплекс упражнений был впервые дан Йоги Бхаджаном 7 декабря 1983 года.

Комплекс упражнений для гипофиза

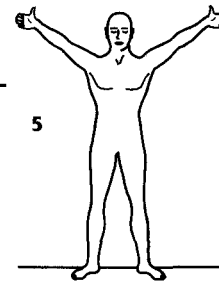


1. Выпад. Шагните вперед правой ногой; колено согнуто; ступня прочно стоит на полу всей подошвой. Левая нога вытянута назад; колено прямое; руки для равновесия касаются пола. Запрокиньте голову и задержитесь в этом положении, дыхание медленное и глубокое. ***1 минута***. Затем начните дышать дыханием огня. Дышите ***2 минуты***.

2. Исходное положение то же, что в ***упражнении 1***. Обопритесь на руки, положите правое колено на пол, лягте на него грудью, коснувшись лбом пола. Левую ногу как можно дальше вытяните назад, руки положите вдоль тела ладонями вверх. Дышите медленно и глубоко ***3 минуты***.

3. Повторите **упражнения 1** и **2** со сменой ноги.

4. Наклон вперед. Встаньте прямо, ступни друг от друга на ширине плеч. Наклонитесь вперед и коснитесь пола кончиками пальцев или ладонями. В этом положении дышите медленно и глубоко. ***3 минуты***.



5. Терминатор эго. Снова встаньте прямо, руки поднимите над головой под углом ***30 градусов*** к полу. Пальцы согните, касаясь подушечками ладоней; большие пальцы направлены вверх. Дыхание медленное и глубокое, локти выпрямлены. Стоять так ***3 минуты***. (Обычно, когда это уп-

Ожигов Юрий Игоревич

Конструктивная физика

Дизайнер Л. Н. Загуменова
Технический редактор А. В. Широбоков
Компьютерный набор и верстка А. В. Моторин
Корректор О. З. Логунова

Подписано в печать 1.06.2010. Формат $60 \times 84^{1}/_{16}$.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 24,65. Уч. изд. л. 26,45.
Гарнитура Таймс. Бумага офсетная №1. Заказ №40.

Научно-издательский центр «Регулярная и хаотическая динамика»
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.
http://shop.rcd.ru E-mail: mail@rcd.ru Тел./факс: (+73412) 500–295