

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

---

Scuola di Scienze  
Dipartimento di Fisica e Astronomia  
Corso di Laurea in Fisica

# RANDOM WALKS CLASSICI E QUANTISTICI

**Relatore:**  
**Prof.ssa Elisa Ercolessi**

**Presentata da:**  
**Ilenia Gabucci**

Anno Accademico 2017/2018



Ringrazio di cuore la mia famiglia, Federico,  
Valentina e tutti gli amici per il supporto.  
Un grazie particolare alla mia relatrice Elisa Ercolessi.  
Sono stati anni faticosi, ma ce l'abbiamo fatta.



## Sommario

Questa tesi si propone di fornire uno studio sul random walk. Partendo da un approfondimento sulla teoria della probabilità alla base di tale processo ed in particolare le distribuzioni Binomiale e Gaussiana, si è potuto studiare il caso del random walk classico, sia nel caso del reticolo monodimensionale che per reticoli a più dimensioni.

Sempre nell'ambito classico si sono analizzati anche i processi stocastici dipendenti dal tempo, detti Processi di Markov, e il moto browniano, per cui si sono ricavate le equazioni del moto della particella browniana, ovvero le equazioni di Langevin.

Si sono in seguito definiti i quattro postulati della meccanica quantistica, introducendo il concetto di quantum bit, per cui si è fornito un confronto con il bit classico.

Si è inoltre trattato il calcolo quantistico, definendo il concetto di porta logica e affrontando l'esempio importante del gate di Hadamard, utile nel caso del random walk quantistico. Quest'ultimo è stato introdotto separando il caso nel discreto e nel continuo, cercando di sottolineare le differenze che presenta con il caso classico.



# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Random Walk Classico</b>	<b>7</b>
2.1	Teoria di Probabilità . . . . .	7
2.1.1	Variabili Stocastiche . . . . .	7
2.1.2	Momenti . . . . .	8
2.1.3	Funzioni Caratteristiche . . . . .	9
2.1.4	Distribuzione Congiunta . . . . .	9
2.1.5	Distribuzione Binomiale . . . . .	10
2.1.6	Distribuzione Gaussiana . . . . .	11
2.1.7	Teorema del Limite Centrale . . . . .	12
2.1.8	Applicazioni delle Distribuzioni Binomiale e Gaussiana . . . . .	13
2.2	Random Walk . . . . .	13
2.2.1	Distribuzione Binomiale per il Random Walk . . . . .	13
2.2.2	Random Walk su Reticolo . . . . .	16
2.2.3	Processi Stocastici . . . . .	18
2.2.4	Moto Browniano . . . . .	21
<b>3</b>	<b>Calcolo Quantistico</b>	<b>24</b>
3.1	I Postulati di Meccanica Quantistica . . . . .	24
3.1.1	Il primo postulato . . . . .	24
3.1.2	Il secondo postulato . . . . .	24
3.1.3	Il terzo postulato . . . . .	25
3.1.4	Il quarto postulato . . . . .	27
3.2	Informazione e Computazione Quantistica . . . . .	28
3.2.1	Quantum Bit . . . . .	28
3.2.2	Calcolo Quantistico . . . . .	30
<b>4</b>	<b>Random Walk Quantistico</b>	<b>33</b>
4.1	Random Walk Quantistico nel Discreto . . . . .	34
4.2	Random Walk Quantistico nel Continuo . . . . .	38

## *INDICE*

---

Elenco delle figure	41
Bibliografia	42



# Capitolo 1

## Introduzione

Il termine "random walk" fu proposto da K. Pearson nel 1905, e indica un processo stocastico a parametro discreto in cui  $X_t$ , dove  $X$  rappresenta una variabile aleatoria, descrive la posizione assunta al tempo  $t$  da un punto in moto.

Proprio nello stesso anno, A. Einstein pubblicò lo studio sul moto browniano, fenomeno scoperto nel 1827 da R. Brown che, studiando al microscopio le particelle di polline in sospensione in acqua, osservò che i granuli di polline erano in continuo movimento e che in ogni istante tale moto avveniva lungo direzioni casuali. Con il termine moto browniano si fa riferimento sia al fenomeno fisico, che alla sua rappresentazione matematica, che può descrivere l'andamento temporale di una classe molto ampia di fenomeni casuali. La grande applicabilità del fenomeno permette di utilizzare gli strumenti matematici che ne derivano in vari ambiti, uno fra tanti è l'andamento dei mercati finanziari, dimostrato nel 1900 dal matematico francese Louis Bachelier, nel suo lavoro "*Théorie de la spéculation*". Al giorno d'oggi risulta molto interessante il caso del random walk quantistico, termine coniato da tre fisici nel 1993, Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury.

Il random walk quantistico si differenzia dal caso classico, in quanto, il "walker" segue i quattro postulati della meccanica quantistica, ovvero, occupa stati definiti e la casualità si verifica a causa di transizioni stocastiche. Nei prossimi capitoli si studieranno i processi dovuti a tali eventi aleatori e le leggi che ne derivano. Si descriveranno le distribuzioni di probabilità, sottolineando il caso della Distribuzione Binomiale per il random walk, in cui risulterà che per un numero di eventi  $N \rightarrow \infty$  la distribuzione approssimerà una Gaussiana.

Sarà inoltre analizzato il caso del random walk su reticolo, in modo da poter mostrare il diverso comportamento di una particella nel caso di reticolo in una o più dimensioni. Sarà quindi portato come esempio più importante di random walk il moto browniano, introdotto precedentemente, mediante cui si ricaveranno le equazioni di Langevin.

Verranno in seguito definiti i postulati della meccanica quantistica, necessari per una descrizione dettagliata del fenomeno, e il concetto di quantum bit.

Infine, si introdurrà il caso del random walk quantistico, facendo una distinzione tra il

caso a tempo discreto e a tempo continuo e, proprio come per il random walk classico, verranno studiate le distribuzioni di probabilità.

Anche per il caso quantistico, si studierà il random walk nel caso a una dimensione, una linea, e nel caso a più dimensioni.

# Capitolo 2

## Random Walk Classico

### 2.1 Teoria di Probabilità

Il Random Walk è un processo stocastico a parametro discreto in cui  $X_t$ , dove  $X$  rappresenta una variabile aleatoria (o casuale), descrive la posizione assunta al tempo  $t$  da un punto in moto.

In questo capitolo ci si soffermerà sulla teoria probabilistica che è alla base dei processi aleatori, in particolare verrà posta attenzione sulla definizione di variabile stocastica e si ricaveranno le distribuzioni Binomiale e Gaussiana, da cui si ricaverà il Teorema del Limite Centrale.

In seguito si approfondiranno il random walk in un reticolo mono-dimensionale e in più dimensioni, per poi analizzarne il comportamento nel limite del discreto e del continuo. Infine, verranno presentati i processi di Markov e il moto browniano, ponendo particolare interesse sull'equazione di Langevin. In questo capitolo verranno utilizzate come fonti principali i manuali di L.E. Reichl [10] e di K. Huang [7].

#### 2.1.1 Variabili Stocastiche

Una variabile stocastica,  $X$ , è una quantità definita da un set di valori possibili, che si verificano con una data distribuzione di probabilità. È possibile introdurre il concetto di variabile stocastica discreta considerando  $X$ , su spazio  $S$ , come un insieme numerabile di  $x_i$ , dove  $i = 1, 2, \dots, n$  (con  $n$  intero finito o  $n = \infty$ ). Alcuni esempi di variabili aleatorie discrete possono essere: il numero di elettroni nella banda di conduzione di un semiconduttore o il numero di molecole di una data componente in una miscela. Il gruppo di variabili può essere anche continuo in un dato intervallo, come per esempio una componente della velocità per una particella browniana (nell'intervallo  $[-\infty, \infty]$ ); oppure in parte discreto e in parte continuo, come nel caso dell'energia di un elettrone in presenza di centri attrattivi.

Si porrà particolare attenzione al caso di stati mono- e bi-dimensionali discreti e continui

su un intervallo.

Nel caso di una variabile stocastica discreta, la distribuzione di probabilità  $\{p_i\}$ , su  $S$ , soddisfa  $p_i \geq 0$  e  $\sum_{i=1}^{\infty} p_i = 1$ .

La funzione di densità di probabilità,  $P_X(x)$ , è definita come:

$$P_X(x) = \sum_{i=1}^n p_i \delta(x - x_i) \quad (2.1)$$

e la funzione di distribuzione  $F_X(x)$  è la probabilità che la variabile stocastica,  $X$ , esista nell'intervallo  $[-\infty, x]$  :

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x dy P_X(y) = \sum_{i=1}^n p_i \Theta(x - x_i) \quad (2.2)$$

dove  $\Theta(x - x_i)$  è la funzione di Heaviside e assume valori  $\Theta(x) = 0$  per  $x < 0$  e  $\Theta(x) = 1$  per  $x > 0$ .

Poichè la densità di probabilità,  $P_X(x)$ , è sempre positiva, la funzione di distribuzione,  $F_X(x)$ , deve essere una funzione monotona crescente di  $x$ , inoltre si ha che  $F_X(-\infty) = 0$  e  $F_X(+\infty) = 1$ .

Nel caso di una variabile continua a tratti, è possibile definire la probabilità in un intervallo  $\{a \leq x \leq b\}$  come:

$$Prob\{a \leq x \leq b\} = \int_a^b dx P_X(x) \quad (2.3)$$

dove  $P_X(x)$  è una funzione continua a tratti.

La densità di probabilità deve soddisfare  $P_X(x) \geq 0$  e  $\int_{-\infty}^{\infty} dx P_X(x) = 1$ .

Con tali ipotesi la funzione di distribuzione  $F_X(x)$  diventa:

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x dy P_X(y) \quad (2.4)$$

e rappresenta la probabilità di trovare  $X$  nell'intervallo  $[-\infty \leq x]$ .

### 2.1.2 Momenti

I momenti forniscono informazioni sull'ampiezza e sulla forma della densità di probabilità  $P_X(x)$ . La densità di probabilità fornisce tutte le informazioni possibili su di essa; quando

non è possibile determinare la  $P_X(x)$ , si cercano informazioni sui momenti di  $X$ .

Il momento  $n$ -esimo di  $X$  è definito come:

$$\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n P_X(x) \quad (2.5)$$

Il momento  $\langle x \rangle$  è detto media.

Sia  $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$  la varianza di  $X$  allora, è possibile definire la deviazione standard di  $X$ ,  $\sigma_x$ , come:

$$\sigma_x \equiv \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (2.6)$$

### 2.1.3 Funzioni Caratteristiche

La funzione caratteristica,  $f_X(k)$ , corrispondente alla variabile stocastica  $X$ , è definita come:

$$f_X(k) = \langle e^{ikx} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} P_X(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n \langle x^n \rangle}{n!} \quad (2.7)$$

Le funzioni caratteristiche sono funzioni continue di  $k$ , inoltre  $f_X(0) = 1$ ,  $|f_X(k)| \leq 1$  e  $f_X(-k) = f_X^*(k)$  (dove  $*$  denota il complesso coniugato). Se la funzione caratteristica è nota, allora la densità di probabilità  $P_X(x)$ , è data da:

$$P_X(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} f_X(k) \quad (2.8)$$

È possibile ottenere i momenti con:

$$\langle x^n \rangle = \lim_{k \rightarrow 0} (-i)^n \frac{d^n f_X(k)}{dk^n} \quad (2.9)$$

La funzione caratteristica  $f_X(x)$  può anche essere scritta in termini di cumulanti,  $C_n(X)$ :

$$f_X(k) = \exp \left( \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} C_n(X) \right) \quad (2.10)$$

dove  $C_n(X)$  è il cumulante di ordine  $n$ ,  $C_1(X)$  rappresenta la media e  $C_2(X)$  rappresenta la varianza.

### 2.1.4 Distribuzione Congiunta

Le variabili stocastiche,  $X_1, X_2, \dots, X_n$ , sono distribuite in modo congiunto se sono definite nello stesso spazio,  $S$ . La funzione di distribuzione congiunta può essere scritta come:

$$F_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) \equiv Prob\{X_1 < x_1, \dots, X_n < x_n\} \quad (2.11)$$

dove  $\{X_1 < x_1, \dots, X_n < x_n\} = \{X_1 < x_1\} \cap \dots \cap \{X_n < x_n\}$ .

La densità di probabilità congiunta,  $P_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n)$  è:

$$P_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) = \frac{\partial^n F_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_1 \dots \partial x_n} \quad (2.12)$$

così che:

$$F_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) = \int_{-\infty}^{x_1} \dots \int_{-\infty}^{x_n} dx_1 \dots dx_n P_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) \quad (2.13)$$

Considerando la densità di probabilità congiunta e la funzione di distribuzione congiunta per due diverse variabili stocastiche,  $X$  e  $Y$ , si ottiene che la densità di probabilità,  $P_{X,Y}(x, y)$ , soddisfa la condizione  $0 \leq P_{X,Y}(x, y) \leq 1$  ed è normalizzata a uno, ovvero:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy P_{X,Y}(x, y) = 1 \quad (2.14)$$

I momenti congiunti delle variabili stocastiche  $X$  e  $Y$ , sono dati da:

$$\langle x^m y^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy x^m y^n P_{X,Y}(x, y) \quad (2.15)$$

I due momenti congiunti più utilizzati sono la covarianza e la funzione di correlazione.

La covarianza è data da:

$$Cov(X, Y) = \langle (x - \langle x \rangle)(y - \langle y \rangle) \rangle = \langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle \quad (2.16)$$

La funzione di correlazione è data da:

$$Cor(X, Y) = \frac{\langle (x - \langle x \rangle)(y - \langle y \rangle) \rangle}{\sigma_x \sigma_y} \quad (2.17)$$

Dove  $\sigma_x$  e  $\sigma_y$  sono le deviazioni standard delle variabili stocastiche  $X$  e  $Y$ .

### 2.1.5 Distribuzione Binomiale

Si considerino  $N$  prove indipendenti e si assuma che ogni prova possa assumere solo due valori in uscita, 0 o 1. Denotando con  $q$  la probabilità di uscita 0, e con  $p$  la probabilità di uscita 1, si ha che  $p + q = 1$ .

Essendo il numero di uscite di 0,  $n_0$ , e il numero di uscite di 1,  $n_1$ , si ha:

$$N = n_0 + n_1 \quad (2.18)$$

La probabilità per ogni combinazione di  $n_0$  e  $n_1$  è detta *Distribuzione Binomiale* ed è definita come:

$$P_N(n_1) = \frac{N!}{n_1!(N - n_1)!} p^{n_1} q^{N - n_1} \quad (2.19)$$

Tale distribuzione soddisfa la condizione di normalizzazione :

$$\sum_{n_1=0}^N P_N(n_1) = \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} = (p+q)^N = 1 \quad (2.20)$$

Se ora si considera  $Y_N = X_1 + \dots + X_N$  variabile stocastica, che descrive il risultato di  $N$  prove indipendenti, è possibile definire la densità di probabilità per  $Y_N$  come:

$$P_{Y_N}(y) = \int \dots \int d_{x_1} \dots d_{x_N} \delta(y - x_1 - \dots - x_N) P_{X_1}(x_1) \times \dots \times P_{X_N}(x_N) \quad (2.21)$$

La funzione caratteristica è data da:

$$f_{Y_N}(k) = \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} e^{in_1 k} \quad (2.22)$$

Pertanto la densità di probabilità per la variabile stocastica  $Y_N$  diventa:

$$P_{Y_N}(y) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-iky} f_{Y_N}(k) = \sum_{n_1=0}^N \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} \delta(y-n_1) = \sum_{n_1=0}^N P_N(n_1) \delta(y-n_1) \quad (2.23)$$

dove  $P_N(n_1)$  è la probabilità che, in  $N$  prove, si verifichi  $n_1$  volte l'uscita 1. È possibile ottenere la media come:

$$\langle n_1 \rangle = pN \quad (2.24)$$

e la deviazione standard come:

$$\sigma_N = \sqrt{Npq} \quad (2.25)$$

### 2.1.6 Distribuzione Gaussiana

Nel limite di  $N \rightarrow \infty$ , la *Distribuzione Binomiale* può essere approssimata alla *Distribuzione Gaussiana*. La formula generale della densità di probabilità Gaussiana, per la variabile stocastica  $Y$ , risulta essere:

$$P_Y(y) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma_Y^2}} \exp\left(-\frac{(y-a)^2}{2\sigma_Y^2}\right) \quad (2.26)$$

La media è  $\langle y \rangle = a$  e la deviazione standard è  $\sigma_Y$ .

La funzione caratteristica è data da:

$$f_Y(k) = \exp\left(iak - \frac{\sigma_Y^2}{2}k^2\right) \quad (2.27)$$

La densità di probabilità per ogni variabile aleatoria  $X_i$ , è:

$$P_X(x; \frac{1}{N}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi(\frac{\sigma_Y^2}{N})}} \exp\left(-\frac{(x - \frac{a}{N})^2}{2(\frac{\sigma_Y^2}{N})}\right) \quad (2.28)$$

Per cui la media è  $\langle x \rangle = (\frac{a}{N})$  e la deviazione standard  $\sigma_X = (\frac{\sigma_Y}{\sqrt{N}})$ .

### 2.1.7 Teorema del Limite Centrale

Il teorema del limite centrale afferma che: “La somma di un grande numero di variabili stocastiche segue la distribuzione Gaussiana, indipendentemente dalla distribuzione di probabilità delle singole variabili stocastiche.” Si consideri una variabile stocastica,  $Y_N$ , così definita:

$$Y_N = \frac{1}{N}(X_1 + \dots + X_N) - \langle x \rangle = Z_1 + \dots + Z_N \quad (2.29)$$

dove  $Z_i = \frac{1}{N}(X_i - \langle x \rangle)$ .

La funzione caratteristica,  $f_Z(k; N)$ , per la variabile stocastica  $Z_i$  è:

$$f_Z(k; N) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(\frac{k}{N})(x - \langle x \rangle)} P_X(x) = 1 - \frac{1}{2} \frac{k^2}{N^2} \sigma_X^2 + \dots \quad (2.30)$$

dove  $\sigma_X^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ . Per grandi  $N$  e varianza finita, i termini di ordini maggiori nell'espansione possono essere trascurati.

Pertanto la funzione caratteristica, per  $N \rightarrow \infty$ , diventa:

$$f_Z(k; N) = \left(1 - \frac{1}{2} \frac{k^2}{N^2} \sigma_X^2 + \dots\right)^N \rightarrow \exp\left(-\frac{k^2 \sigma_X^2}{2N}\right) \quad (2.31)$$

La densità di probabilità risulta essere, per  $N \rightarrow \infty$ :

$$P_{Y_N}(y) \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{iky} \exp\left(-\frac{k^2 \sigma_X^2}{2N}\right) = \sqrt{\frac{N}{2\pi \sigma_X^2}} \exp\left(-\frac{Ny^2}{2\sigma_X^2}\right) \quad (2.32)$$

Se  $P_X(x)$  ha momenti finiti, allora la media del gran numero di misure indipendenti di  $X$  sarà una Gaussiana centrata in  $\langle x \rangle$ , con deviazione standard pari a  $\frac{1}{\sqrt{N}}$  volte la deviazione standard della densità di probabilità di  $X$ .

### 2.1.8 Applicazioni delle Distribuzioni Binomiale e Gaussiana

Per sottolineare l'importanza di tali distribuzioni ci si soffermerà su alcuni esempi [13].

Si considerino due segmenti, il primo,  $AD$ , di lunghezza  $l$ , e il secondo,  $BC$ , di lunghezza  $s = \frac{l}{5}$  contenuto nel primo. La probabilità che un punto all'interno del segmento  $AD$  sia contenuto in  $BC$ , è data da  $p = \frac{s}{l} = 0.2$ .

Si considerino ora  $N$  punti in  $AD$ , la probabilità che  $n_1$  di  $N$  punti siano contenuti in  $BC$  è data dalla Distribuzione Binomiale (2.20).

Il problema è formalmente identico se  $AD$  e  $BC$  sono intervalli di tempo invece di segmenti.

È possibile fare un ulteriore esempio di Distribuzione Binomiale considerando il caso di una moneta.

Quando una moneta viene lanciata, la probabilità di avere in uscita "testa" è  $p = 0.5$ . Per valutare la probabilità di ottenere  $\frac{N}{2}$  "teste", avendo lanciato la moneta  $N$  volte, è possibile utilizzare la Distribuzione Binomiale, la quale permette di calcolare la probabilità di  $n_1$  "teste", dopo  $N$  lanci.

La probabilità possiede un massimo in  $n_1 = \frac{N}{2}$ , tuttavia, al crescere di  $N$ , la probabilità di ottenere esattamente  $n_1 = \frac{N}{2}$  "teste" diminuisce progressivamente. Questo fatto può essere spiegato considerando la distribuzione come una funzione della frequenza  $n_1/N$ . Si osserverà che all'aumentare di  $N$ , i valori di  $n_1/N$  saranno distribuiti in modo sempre più denso attorno al valore centrale di probabilità  $p = 0.5$ .

Per  $N \rightarrow \infty$  questi esempi possono essere approssimati al caso di una Distribuzione Gaussiana.

## 2.2 Random Walk

### 2.2.1 Distribuzione Binomiale per il Random Walk

La distribuzione binomiale può essere applicata al problema del random walk. Se si considera una particella che compie  $N$  spostamenti lungo l'asse  $x$ , fissata la probabilità pari a  $\frac{1}{2}$  di muoversi verso destra o sinistra di una quantità  $\Delta$ , tenendo conto che ogni spostamento è indipendente. Per lo spostamento *i-esimo*, la variabile stocastica  $X_i$  avrà  $x = +\Delta$  per spostamenti verso destra, mentre  $x = -\Delta$  per spostamenti verso sinistra. Pertanto, la densità di probabilità per lo spostamento *i-esimo* è:

$$P_{X_i}(x) = \frac{1}{2}(\delta(x + \Delta) + \delta(x - \Delta)) \quad (2.33)$$

mentre la funzione caratteristica è data da:

$$f_{X_i}(k) = \cos(k\Delta) \quad (2.34)$$

Lo spostamento netto,  $Y_N$ , della particella dopo  $N$  spostamenti è dato da  $Y_N = X_1 + \dots + X_N$ , e la funzione caratteristica corrispondente è:

$$f_{Y_N}(k) = (\cos(k\Delta))^N = \left(1 - \frac{k^2\Delta^2}{2!} + \dots\right)^N \approx 1 - \frac{Nk^2\Delta^2}{2!} + \dots \quad (2.35)$$

La media risulta essere  $\langle y \rangle = 0$  e la deviazione standard  $\sigma_{Y_N} = \Delta\sqrt{N}$ .

È possibile trovare la funzione caratteristica considerando spostamenti  $\Delta$  e tempi tra due spostamenti consecutivi  $\tau$  infinitesimamente piccoli:

$$f_Y(k, (N+1)\tau) - f_Y(k, N\tau) = (\cos(k\Delta) - 1)f_Y(k, N\tau) = \left(-\frac{k^2\Delta^2}{2} + \dots\right) f_Y(k, N\tau) \quad (2.36)$$

Considerando il limite per  $N \rightarrow \infty$ ,  $\tau \rightarrow 0$  e  $\Delta \rightarrow 0$ , così che  $D = \left(\frac{\Delta^2}{2\tau}\right)$  sia finito ( $D$  rappresenta il coefficiente di diffusione del random walk) e  $t = N\tau$ , si nota che:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{f_Y(k, (N+1)\tau) - f_Y(k, N\tau)}{\tau} = \frac{\partial f_Y(k, t)}{\partial t} \quad (2.37)$$

e

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\tau \rightarrow 0} \lim_{\Delta \rightarrow 0} \left(-\frac{k^2\Delta^2}{2\tau} + \dots\right) f_Y(k, N\tau) = -Dk^2 f_Y(k, t) \quad (2.38)$$

Da cui si ottiene:

$$\frac{\partial f_Y(k, t)}{\partial t} = -Dk^2 f_Y(k, t) \quad (2.39)$$

Per il caso in cui  $f_Y(k, 0) = 1$ , l'equazione precedente ha come soluzione:

$$f_Y(k, t) = e^{-Dk^2 t} \quad (2.40)$$

La distribuzione di probabilità risulta essere:

$$P(y, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-iky} e^{-Dk^2 t} = \sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{y^2}{4Dt}\right) \quad (2.41)$$

## 2. Random Walk Classico

La densità di probabilità per un *random walker* è una Gaussiana, la cui deviazione standard è  $\sigma = \sqrt{2Dt}$ .

Se si cambia la variabile stocastica,  $Z_N = (\frac{Y_N}{\Delta\sqrt{N}})$ , la funzione caratteristica, associata alla variabile stocastica  $Z_N$  diventa:

$$f_{Z_N}(k) = \left(\cos\left(\frac{k}{\sqrt{N}}\right)\right)^N \quad (2.42)$$

e la densità di probabilità per lo spostamento netto,  $Y_N$ , ora diventa:

$$P_{Y_N}(y) \approx \int_{-\infty}^{\infty} dz \delta(y - \Delta\sqrt{N}z) P_Z(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta^2N}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\Delta^2N}\right) \quad (2.43)$$

dove è stato possibile scrivere  $P_{Z_N}(z) \approx P_Z(z)$  avendo considerato grandi  $N$ .

Se la particella fa  $n$  spostamenti per unità di tempo, allora  $N = nt$  e la densità di probabilità che la particella si trovi nell'intervallo  $y \rightarrow y + dy$ , lungo l'asse  $x$  e al tempo  $t$ , è:

$$P_{Y_N}(y) \approx \int_{-\infty}^{\infty} dz \delta(y - \Delta\sqrt{N}z) P_Z(z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{y^2}{4Dt}\right) \quad (2.44)$$

dove  $D = \frac{1}{2}n\delta^2$ .

Inizialmente  $P(y, t)$  ha la forma della funzione  $\delta(y)$ , con il passare del tempo, l'area totale al di sotto della curva rimane uguale a uno, ma la probabilità di trovare delle particelle, ad una certa distanza dall'asse delle  $x$ , aumenta all'aumentare del tempo, in quanto la deviazione standard aumenta come la radice quadrata del tempo:  $\sigma = \sqrt{\Delta^2N} = \sqrt{2Dt}$ .

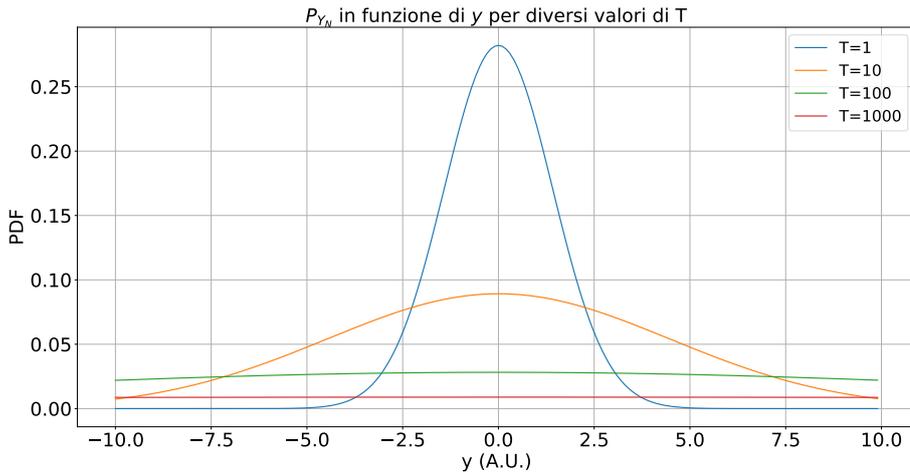


Figura 2.1: Distribuzione Gaussiana a vari istanti di tempo

### 2.2.2 Random Walk su Reticolo

Il problema del random walk su reticolo rappresenta una delle applicazioni più semplici di tale processo e in questo paragrafo si svilupperà l'argomento in reticoli ad una e più dimensioni.

Considerando un reticolo mono-dimensionale, periodico, costituito da  $2N + 1$  siti, definisco con  $P_s(l)$  la probabilità di trovare una particella nel sito  $l$ , al tempo  $s$ .

La densità di probabilità corrispondente all'*i-esimo* spostamento sarà:

$$p(l_i) = \frac{1}{2}(\delta_{l_i,+1} + \delta_{l_i,-1}) \quad (2.45)$$

avendo assunto che ogni spostamento sia indipendente e che la particella parta dal sito  $l = 0$ , al tempo  $s = 0$ .

Pertanto, la probabilità  $P_s(l)$  è data da:

$$P_s(l) = \sum_{l_1=-N}^N \cdots \sum_{l_s=-N}^N \delta_{l,l_1+\dots+l_s} p(l_1)p(l_2) \times \cdots \times p(l_s) \quad (2.46)$$

È possibile espandere  $P_s(l)$  in serie di Fourier (poichè è una funzione periodica di  $l$ ):

$$P_s(l) = \frac{1}{2N+1} \sum_{n=-N}^N f_s(n) \exp\left(-\frac{2\pi i n l}{2N+1}\right) \quad (2.47)$$

dove la  $f_s(n)$  rappresenta l'ampiezza di Fourier e non è altro che la funzione caratteristica:

$$f_s(n) = \sum_{l=-N}^N P_s(l) \exp\left(+\frac{2\pi i n l}{2N+1}\right) \quad (2.48)$$

Si consideri il limite per  $N \rightarrow \infty$  e si definisca la variabile  $\phi = \frac{2\pi n}{(2N+1)}$ , allora si ricava:

$$P_s(l) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi f_s(\phi) e^{-i l \phi} \quad (2.49)$$

e la funzione caratteristica diventa:

$$f_s(\phi) = (\lambda(\phi))^s \quad (2.50)$$

Pertanto la  $P_s(l)$  per il random walk in un reticolo mono-dimensionale, se la particella parte da  $l = 0$ , diventa:

$$P_s(l) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi (\cos(\phi))^s e^{-i l \phi} = \begin{cases} \left(\frac{1}{2}\right)^s \frac{s!}{\left(\frac{s-l}{2}\right)! \left(\frac{s+l}{2}\right)!} & \text{per } s-l \text{ e } s \geq l \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (2.51)$$

La probabilità di una particella di uscire dall'origine è data da :

$$P_{escape} = \frac{1}{U(1, \mathbf{0})} \quad (2.52)$$

dove  $U$  è la funzione generatrice; per il caso mono-dimensionale  $U(1, \mathbf{0}) = \infty$  e  $P_{escape} = 0$ . Quindi in questo caso, la particella ha probabilità pari a 1 di tornare nell'origine, se è il punto da cui è partita.

È possibile generalizzare lo studio effettuato per un reticolo mono-dimensionale al caso in più dimensioni (d-dimensionale).

Sia  $\hat{\mathbf{x}}_i$  ( $i = 1, \dots, d$ ) vettore per le varie direzioni ortogonali nello spazio; se i siti del reticolo si trovano a distanza unitaria, allora è possibile denotare la loro posizione con  $l = l_1\hat{\mathbf{x}}_1 + \dots + l_d\hat{\mathbf{x}}_d$ , dove gli  $l_i$  sono interi.

La probabilità di trovare la particella nel sito  $\mathbf{l}$ , al tempo  $s$ , è:

$$P_s(\mathbf{l}) = \left(\frac{1}{2N+1}\right)^d \sum_{n_1=-N}^N \dots \sum_{n_d=-N}^N f_s(\mathbf{n}) \exp\left(-\frac{2\pi\mathbf{n}\cdot\mathbf{l}}{2N+1}\right) \quad (2.53)$$

che è stata sviluppata in serie di Fourier. Si ha che  $\mathbf{n} = n_1\hat{\mathbf{x}}_1 + \dots + n_d\hat{\mathbf{x}}_d$ , mentre l'ampiezza di Fourier è definita da:

$$f_s(\mathbf{n}) = \sum_{l_1=-N}^N \dots \sum_{l_d=-N}^N P_s(\mathbf{l}) \exp\left(\frac{2\pi\mathbf{n}\cdot\mathbf{l}}{2N+1}\right) \quad (2.54)$$

Considerando il limite per  $N \rightarrow \infty$  e introducendo le variabili  $\phi = \frac{2\pi n_i}{2N+1}$ , con  $i = 1, \dots, d$  e  $\varphi = \phi_1\hat{\mathbf{x}}_1 + \dots + \phi_d\hat{\mathbf{x}}_d$ , si ricava:

$$P_s(\mathbf{l}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^d \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_1 \dots \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_d f_s(\phi) e^{-i\mathbf{l}\cdot\varphi} \quad (2.55)$$

e

$$f_s(\varphi) = \sum_{l_1=-\infty}^{\infty} \dots \sum_{l_d=-\infty}^{\infty} P_s(\mathbf{l}) e^{+i\mathbf{l}\cdot\varphi} \quad (2.56)$$

È interessante osservare il caso bi-dimensionale (quando  $d = 2$ ). Se la spaziatura del reticolo è  $a = 1$  e la particella si muove indistintamente in ogni direzione, la probabilità per un singolo spostamento è data da:

$$p(\mathbf{l}) = \frac{1}{4} \sum_{\varepsilon=\pm 1} (\delta_{l_1,\varepsilon}\delta_{l_2,0} + \delta_{l_1,0}\delta_{l_2,\varepsilon}) \quad (2.57)$$

dove  $\mathbf{l} = l_1 \hat{\mathbf{x}}_1 + l_2 \hat{\mathbf{x}}_2$ .

La funzione caratteristica è:

$$\lambda(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_{l_1=-\infty}^{\infty} \sum_{l_2=-\infty}^{\infty} p(\mathbf{l}) e^{+i\mathbf{l} \cdot \boldsymbol{\varphi}} \quad (2.58)$$

dove  $\boldsymbol{\varphi} = \phi_1 \hat{\mathbf{x}}_1 + \phi_2 \hat{\mathbf{x}}_2$ .

La probabilità di una particella di uscire dall'origine è  $P_{escape} = 0$ , poichè la funzione generatrice :

$$U(\mathbf{1}, \mathbf{0}) = \frac{2}{\pi} K(z) \quad (2.59)$$

per  $k \rightarrow 1$ ,  $K(k) \rightarrow \infty$ , dove  $K(k)$  è un integrale ellittico di prima specie [11], e per  $z \rightarrow 1$ ,  $U(\mathbf{1}, \mathbf{0}) \rightarrow \infty$ .

Nel caso tri-dimensionale si avrà:

$$p(\mathbf{l}) = \frac{1}{6} \sum_{\varepsilon=\pm 1} (\delta_{l_1,\varepsilon} \delta_{l_2,0} \delta_{l_3,0} + \delta_{l_1,0} \delta_{l_2,\varepsilon} \delta_{l_3,0} + \delta_{l_1,0} \delta_{l_2,0} \delta_{l_3,\varepsilon}) = \frac{1}{2} (\cos(\phi_1) + \cos(\phi_2)) \quad (2.60)$$

e

$$\lambda(\boldsymbol{\varphi}) = \frac{1}{3} (\cos(\phi_1) + \cos(\phi_2) + \cos(\phi_3)) \quad (2.61)$$

La probabilità di uscita dall'origine, in questo caso, sarà  $P_{escape} = \frac{1}{U(\mathbf{1}, \mathbf{0})} \approx 0.66$ , pertanto la particella nel reticolo tri-dimensionale ha un'alta probabilità di non tornare all'origine, se quella era il punto di inizio. La particella può uscire, mentre nel caso mono- e bi-dimensionale non poteva mai uscire dall'origine.

I random walk la cui probabilità di uscita è zero, sono detti *persistenti*, mentre quando è finita sono detti *transienti*.

### 2.2.3 Processi Stocastici

Una volta fornite le basi di teoria probabilistica è possibile studiare situazioni più complicate, in cui si ha dipendenza dal tempo. Condizioni di questo tipo sono dette *Processi di Markov*, in cui la probabilità di transizione che determina il passaggio a uno stato di sistema dipende solo dallo stato del sistema immediatamente precedente (proprietà di Markov) e non da come si sia giunti a tale stato.

Tali transizioni sono il motivo per cui la probabilità di trovare il sistema in un dato stato cambia fin quando quest'ultimo non raggiunge uno stato finale, in cui le transizioni non possono più causare ulteriori variazioni nella distribuzione di probabilità.

Si consideri un sistema le cui proprietà siano descritte in termini della sola variabile aleatoria  $Y$ . Si avrà che un processo è detto *stazionario* se:

$$P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) = P_n(y_1, t_1 + \tau; \dots; y_n, t_n + \tau) \quad (2.62)$$

per ogni  $n$  e  $\tau$ .

Ogni processo fisico in equilibrio è stazionario e vale quindi:

$$P_1(y_1, t_1) = P_1(y_1) \quad (2.63)$$

dove  $P_1(y_1, t_1)$  è la densità di probabilità che la variabile stocastica  $Y$  abbia valore  $y_1$  al tempo  $t_1$ .

È possibile ottenere la relazione tra densità di probabilità corrispondenti a tempi differenti:

$$P_1(y_2, t_2) = \int P_1(y_1, t_1) P_{1|1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) dy_1 \quad (2.64)$$

dove  $P_{1|1}(y_1, t_1 | y_2, t_2)$  rappresenta la densità di probabilità condizionale, per la variabile  $Y$ , di avere valore  $y_2$  al tempo  $t_2$  dati  $y_1$  al tempo  $t_1$ . È detta anche probabilità di transizione e ha la proprietà:

$$\int P_{1|1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) dy_2 = 1 \quad (2.65)$$

La densità di probabilità congiunta condizionale è:

$$P_{k|l}(y_1, t_1; \dots; y_k, t_k | y_{k+1}, t_{k+1}; \dots; y_{k+l}, t_{k+l}) = \frac{P_{k+1}(y_1, t_1; \dots; y_k, t_k; y_{k+1}, t_{k+1}; \dots; y_{k+l}, t_{k+l})}{P_k(y_1, t_1; \dots; y_k, t_k)} \quad (2.66)$$

La densità di probabilità congiunta risulta essere importante quando c'è correlazione tra i valori (a diversi  $t$ ) della variabile stocastica, nel caso in cui questa abbia memoria del passato.

Se la variabile stocastica ha memoria solo dell'immediato passato, la densità di probabilità congiunta condizionale è data da:

$$P_{n-1|1}(y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1} | y_n, t_n) = P_{1|1}(y_{n-1}, t_{n-1} | y_n, t_n) \quad (2.67)$$

Un processo per cui vale tale equazione è detto *processo di Markov*, che è determinato dalle due funzioni  $P_1(y, t)$  e  $P_{1|1}(y_1, t_1 | y_2, t_2)$ .

È ora possibile introdurre l'equazione di *Chapman-Kolmogorov* [12]:

$$P_{1|1}(y_1, t_1 | y_3, t_3) = \int P_{1|1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_3, t_3) dy_2 \quad (2.68)$$

dove il tempo  $t_2$  è compreso tra i tempi  $t_1$  e  $t_3$ .

Tale equazione è un'identità che deve essere rispettata dalla probabilità di transizione di ogni processo di Markov e afferma che la probabilità di passare dallo stato 1 allo stato 3 può essere determinata dalle probabilità di passare dallo stato 1 a uno stato intermedio 2 e quindi dallo stato 2 al 3, sommando tutti possibili stati intermedi.

L'equazione vale anche quando  $y$  è un vettore di  $r$  componenti o anche quando  $y$  assume solo valori discreti, in modo che l'integrale risulti una somma.

Il processo che si andrà ora a considerare sono le *catene di Markov*, in cui le transizioni avvengono tra le realizzazioni di variabili stocastiche discrete, in tempi discreti, come nel caso del Random Walk.

Si assuma che  $Y$ , variabile aleatoria, abbia realizzazione  $y(n)$ , in cui  $n = 1, 2, \dots, M$  e che le transizioni avvengano ai tempi  $t = s\tau$ , dove  $s = 0, 1, \dots, \infty$ .

Denotando con  $P(n, s)$  la probabilità che  $Y$  abbia realizzazione  $y(n)$ , al tempo  $t = s$  e con  $P_{1|1}(n_1, s_1|n_2, s_2)$  la probabilità condizionale, è possibile determinare l'evoluzione della catena di Markov. La formula (2.64), in questo caso, può essere riscritta come:

$$P(n, s + 1) = \sum_{m=1}^M P(m, s)P_{1|1}(m, s|n, s + 1) \quad (2.69)$$

e utilizzando la formula (2.68), la probabilità condizionale diventa:

$$P_{1|1}(n_0, s_0|n, s + 1) = \sum_{m=1}^M P_{1|1}(n_0, s_0|m, s)P_{1|1}(m, s|n, s + 1) \quad (2.70)$$

dove  $P_{1|1}(m, s|n, s + 1)$  è detta probabilità di transizione, e rappresenta la probabilità che il sistema, in stato  $m$  al tempo  $s$ , salti in uno stato  $n$  in corrispondenza dello spostamento successivo.

Il problema del random walk può essere formulato considerando un reticolo monodimensionale infinito, con spaziatura del reticolo,  $\Delta$ , lungo l'asse  $x$ , e tempo tra due spostamenti uguale a  $\tau$ .

La probabilità di trovare una particella in un punto  $x = n\Delta$ , dopo  $s$  spostamenti sarà data da:

$$P_1(n\Delta, (s + 1)\tau) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} P_1(m\Delta, s\tau)P_{1|1}(m\Delta, s\tau|n\Delta, (s + 1)\tau) \quad (2.71)$$

dove il secondo termine della sommatoria indica la probabilità di transizione di muoversi dal sito  $x = m\Delta$  a  $x = n\Delta$ , dopo uno step.

Nel caso del limite del continuo è possibile ottenere l'equazione differenziale per la probabilità  $P_1(n\Delta, s\tau)$ .

Siano  $x = n\Delta$  e  $t = s\tau$  finiti, si prenda il limite  $\Delta \rightarrow 0$  e  $\tau \rightarrow 0$ , così che  $D \equiv \frac{\Delta^2}{2\tau}$  sia finito, si ottiene quindi:

$$\frac{\partial P_1(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P_1(x, t)}{\partial x^2} \quad (2.72)$$

che rappresenta l'equazione di diffusione per la densità di probabilità  $P_1(x, t)$ .

Nel caso in cui  $P_1(x, 0) = \delta(x)$ , considerando la trasformata di Fourier  $\tilde{P}_1(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx P_1(x, t) e^{ikx}$ , si ottiene la soluzione:

$$\tilde{P}(k, t) = e^{-Dk^2 t} \quad (2.73)$$

avendo posto  $\tilde{P}(k, 0) = 1$ .

La trasformata inversa risulta essere:

$$P_1(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} e^{-Dk^2 t} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (2.74)$$

Da cui si vede che  $\langle x(t) \rangle = 0$  e  $\langle x^2(t) \rangle = 2Dt$ .

### 2.2.4 Moto Browniano

Il moto Browniano definisce il moto aleatorio di una particella, sospesa in un fluido, le cui molecole collidono con essa, determinando così una traiettoria casuale della particella. Il moto browniano è stato studiato ad inizio '800 e ha trovato una soluzione solo nel 1905, con il modello utilizzato da Albert Einstein.

È possibile ricavare la teoria del moto Browniano prendendo in considerazione l'equazione di Langevin per una particella Browniana. Si consideri una particella in un fluido sottoposta a moto Browniano e si assuma che tale particella sia libera di muoversi nel fluido, considerando che quest'ultimo oppone al moto una forza di attrito, proporzionale alla velocità, e una forza random,  $F(t)$ , dovuta alle fluttuazioni casuali. Le equazioni del moto per tale particella sono:

$$\frac{dv(t)}{dt} = -\frac{\gamma}{m}v(t) + \frac{1}{m}F(t) \quad (2.75)$$

e

$$\frac{dx(t)}{dt} = v(t) \quad (2.76)$$

dove  $v(t)$  e  $x(t)$  sono rispettivamente la velocità e la posizione, mentre  $\gamma$  è il coefficiente di attrito.

Tali equazioni sono le *equazioni di Langevin* del moto di una particella Browniana. La forza random,  $F(t)$ , è una variabile stocastica dovuta agli effetti del rumore di fondo, causati dal fluido, sulla particella Browniana. Si assume che  $F(t)$  abbia una distribuzione Gaussiana, con media nulla, tale che  $\langle F(t) \rangle = 0$  e sia:

$$\langle F(t_1)F(t_2) \rangle = 2\pi K_0 \delta(t_1 - t_2) \quad (2.77)$$

## 2. Random Walk Classico

---

Integrando l'equazione di Langevin, avendo fissato un certo valore  $v$ , si ha:

$$\Delta v = -\gamma v \Delta t + \frac{1}{m} \int_t^{t+\Delta t} dt' F(t') \quad (2.78)$$

risulta necessario integrare su  $F$  e, sapendo che  $\langle F \rangle = 0$ , si ottiene:

$$A(v) = -\gamma v \quad (2.79)$$

Utilizzando:

$$\langle (\Delta v)^2 \rangle = \gamma^2 v^2 (\Delta t)^2 + \frac{1}{m^2} \int_t^{t+\Delta t} dt_1 \int_t^{t+\Delta t} dt_2 \langle F(t_1) F(t_2) \rangle \quad (2.80)$$

e risolvendo il doppio integrale, che risulta essere uguale a  $2\pi K_0 \Delta t$ , si avrà:

$$B(v) = \frac{2\pi K_0}{m^2} \quad (2.81)$$

da cui è possibile ricavare l'equazione di Fokker-Planck [9]:

$$\frac{\partial P}{\partial t} - \gamma \frac{\partial}{\partial v} (vP) - \frac{\pi K_0}{m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} = 0 \quad (2.82)$$

dove  $P(v, t)dv$  risulta essere la probabilità di trovare  $v$  entro  $dv$ , al tempo  $t$ .

La soluzione di tale equazione risulta pertanto essere:

$$P(v, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi u}} e^{-(v-a)^2/2b} \quad (2.83)$$

con  $a = v_0 e^{-\gamma t}$  e  $b = \frac{K_0}{m^2 \gamma} (1 - e^{-\gamma t})$ .

È importante notare che tale equazione risulta essere una Distribuzione Gaussiana e, quando  $t \rightarrow \infty$ , si ha che la varianza vale:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{K_0}{m^2 \gamma} \quad (2.84)$$

È inoltre possibile seguire un altro percorso, ovvero, partendo dall'equazione di Langevin:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} = \frac{F}{m} \quad (2.85)$$

e moltiplicando entrambi i lati per  $x$  e considerando la media:

$$\langle x \frac{d^2 x}{dt^2} \rangle + \gamma \langle x \frac{dx}{dt} \rangle = 0 \quad (2.86)$$

dove si è usato  $\langle xF \rangle = 0$ , è possibile scrivere:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left\langle \frac{dx^2}{dt} \right\rangle - \langle v^2 \rangle + \frac{\gamma}{2} \left\langle \frac{dx^2}{dt} \right\rangle = 0 \quad (2.87)$$

dove  $\langle v^2 \rangle = u$ . Allora per  $t \rightarrow \infty$  si ha:

$$\left\langle \frac{dx^2}{dt} \right\rangle = \frac{2u}{\gamma} = \frac{K_0}{m^2 \gamma^2} \quad (2.88)$$

oppure

$$\langle x^2 \rangle = \frac{K_0 t}{m^2 \gamma^2} \quad (2.89)$$

definendo mediante  $D = \frac{K_0}{2m^2 \gamma^2}$  la costante di diffusione.

La relazione di Einstein può inoltre essere ottenuta osservando che  $\langle v^2 \rangle = kT/m$ , confrontandola con la (2.84), si ottiene  $K = m\gamma kT$ , che conduce a:

$$D = \frac{kT}{2m\gamma} \quad (2.90)$$

dove si definisce la mobilità  $\eta = \frac{1}{2m\gamma}$ .

# Capitolo 3

## Calcolo Quantistico

### 3.1 I Postulati di Meccanica Quantistica

In questo capitolo ci si soffermerà sui postulati della meccanica quantistica, verrà in seguito posta attenzione sulla definizione di qubit.

Verrà poi fornito un cenno sulla teoria dei gate quantistici studiando, come esempio, la porta NOT. Come fonte principale di tale capitolo è stato utilizzato il manuale di A. Nielsen, I. L. Chuang [1].

#### 3.1.1 Il primo postulato

Il primo postulato afferma che: “*Ad ogni sistema fisico isolato è associato un vettore complesso,  $|\psi\rangle$ , appartenente ad uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ , detto spazio degli stati. Il sistema è completamente descritto dal suo vettore dello stato, che è un vettore unitario nello spazio degli stati.*”

La condizione che  $|\psi\rangle$  sia un vettore unitario, ovvero che  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ , è anche conosciuta come condizione di normalizzazione.

Essendo  $\alpha_i \in \mathbb{C}$  l'ampiezza dello stato, è possibile definire la combinazione lineare  $\sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle$ .

#### 3.1.2 Il secondo postulato

Il secondo postulato afferma che: “*L'evoluzione temporale di un sistema quantistico chiuso è descritta da una trasformazione unitaria, ovvero, lo stato  $|\psi(t_1)\rangle$  è legato allo stato  $|\psi(t_2)\rangle$  del sistema mediante un operatore unitario  $U$ , detto di evoluzione, che dipende solo dai tempi  $t_1$  e  $t_2$ .*”

Pertanto:

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_1, t_2)|\psi(t_1)\rangle \quad (3.1)$$

È possibile definire una versione di tale postulato nel caso in cui l'evoluzione del sistema quantistico avvenga nell'ipotesi di tempo continuo. Un sistema quantistico chiuso, che evolve nel tempo, è descritto dall'equazione di Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle \quad (3.2)$$

dove  $\hbar$  è la costante di Planck ridotta e  $H$  rappresenta l'Hamiltoniana del sistema (contiene tutte le informazioni riguardanti la dinamica del sistema stesso ed è indipendente dal tempo). L'Hamiltoniana è un operatore Hermitiano e può essere decomposta in:

$$H = \sum_E E|E\rangle\langle E| \quad (3.3)$$

dove  $E$  rappresenta gli autovalori corrispondenti agli autovettori  $|E\rangle$ . Gli stati  $|E\rangle$  sono spesso indicati come autostati di energia, lo stato di energia minore è detto stato fondamentale del sistema.

Sono anche noti come stati stazionari, poichè la loro evoluzione temporale consiste nell'acquisire un fattore pari a:

$$|E\rangle \rightarrow \exp(-iEt/\hbar)|E\rangle \quad (3.4)$$

Pertanto è possibile mostrare che la connessione tra l'Hamiltoniana  $H$  e l'operatore unitario  $U$  è data ricavando la soluzione per l'equazione di Schrödinger e scrivendo:

$$|\psi(t_2)\rangle = \exp\left[\frac{-iH(t_2 - t_1)}{\hbar}\right] |\psi(t_1)\rangle = U(t_1, t_2)|\psi(t_1)\rangle \quad (3.5)$$

avendo posto  $U(t_1, t_2) = \exp\left[\frac{-iH(t_2 - t_1)}{\hbar}\right]$ .

### 3.1.3 Il terzo postulato

Il terzo postulato afferma che :*“Le misure quantistiche sono descritte dagli operatori di misura  $\{M_m\}$ , che agiscono sullo spazio degli stati”*. Se lo stato del sistema è  $|\psi\rangle$  immediatamente prima della misura, allora la probabilità,  $p(m)$ , che si verifichi  $m$  è:

$$p(m) = \langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle \quad (3.6)$$

e lo stato del sistema dopo la misura risulterà essere:

$$\frac{M_m|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle}} \quad (3.7)$$

dove gli operatori di misura soddisfano  $\sum_m M_m^\dagger M_m = I$ , detta equazione di completezza.

Un caso importante legato al terzo postulato è quello noto con il nome di *misure di proiezione*. Una misura di proiezione è descritta da un'osservabile,  $M$ , che è un operatore Hermitiano sullo spazio degli stati del sistema che si sta osservando. Poichè  $M$  è un operatore Hermitiano, ha una decomposizione spettrale:

$$M = \sum_m m P_m \quad (3.8)$$

dove  $P_m$  è la proiezione sull'autospazio di  $M$ , con autovalore  $m$ .

Dopo aver effettuato la misura su  $|\psi\rangle$ , la probabilità di avere come risultato  $m$  è data da:

$$p(m) = \langle \psi | P_m | \psi \rangle \quad (3.9)$$

e lo stato del sistema immediatamente dopo la misura risulta essere:

$$\frac{P_m |\psi\rangle}{\sqrt{p(m)}} \quad (3.10)$$

Il terzo postulato si riduce al caso di misure di proiezione facendo l'ipotesi che  $M_m$  sia una proiezione ortogonale e che siano soddisfatte:

- La relazione di completezza:

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = I \quad (3.11)$$

- La condizione di ortonormalità:

$$M_m M_{m'} = \delta_{m,m'} M_m \quad (3.12)$$

È inoltre possibile calcolare il valore medio dell'osservabile  $M$  e il valore della deviazione standard. Infatti, il valore medio risulta essere:

$$\begin{aligned} \langle M \rangle &= \sum_m m p(m) \\ &= \sum_m m \langle \psi | P_m | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \left( \sum_m m P_m \right) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | M | \psi \rangle \end{aligned} \quad (3.13)$$

e la deviazione standard associata a  $M$  è:

$$|\Delta(M)|^2 = \langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \quad (3.14)$$

È interessante osservare che considerando un grande numero di esperimenti, in cui lo stato  $|\psi\rangle$  è dato e l'osservabile  $M$  è misurato, la deviazione standard è determinata dalla formula  $\Delta(M) = \sqrt{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}$ .

Questo tipo di formulazione delle misurazioni e della deviazione standard, in termini di osservabili, diede luogo a risultati come *Il Principio di Indeterminazione di Heisenberg*.

Nel caso delle osservabili è anche possibile limitarsi al caso in cui le misure vengono effettuate su una base  $|m\rangle$  di vettori ortonormali, definendo il proiettore  $P_m = |m\rangle\langle m|$ , per cui devono essere soddisfatte le condizioni di ortonormalità e la relazione di completezza.

Esistono comunque misure di carattere più generale, dette *POVM* (che sta per "Positive Operator-Valued Measure"), ed è una conseguenza dovuta alla descrizione generale effettuata nel terzo postulato.

Si supponga che le misure, descritte dagli operatori  $M_m$ , siano effettuate su un sistema quantistico negli stati  $|\psi\rangle$ . Allora, la probabilità di avere come risultato  $m$ , è data da  $p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle$ .

Inoltre, definendo

$$E_m \equiv M_m^\dagger M_m \quad (3.15)$$

dove  $E_m$  è un operatore positivo, tale che siano soddisfatte  $\sum_m E_m = I$  e  $p(m) = \langle \psi | E_m | \psi \rangle$ , è possibile affermare che l'insieme di operatori  $E_m$  è sufficiente per determinare le probabilità delle diverse misure dei risultati.

Quindi l'insieme  $\{E_m\}$  è detto *POVM*.

### 3.1.4 Il quarto postulato

Il quarto postulato afferma che: *“Lo spazio degli stati di un sistema fisico composto, cioè un sistema quantistico costituito da due (o più) sistemi fisici distinti, è il prodotto tensoriale degli spazi degli stati dei vari sistemi. Lo spazio di Hilbert totale è:  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n$ . Un vettore di tale spazio è una generica combinazione lineare di vettori del tipo  $\psi_1 \otimes \psi_2 \otimes \dots \otimes \psi_n$ . Per spiegare il motivo dell'utilizzo del prodotto tensoriale, utilizzato nella definizione di sistema composto, è necessario definire il Principio di sovrapposizione in meccanica quantistica.*

Tale principio afferma che, se  $|x\rangle$  e  $|y\rangle$  sono due stati di un sistema quantistico allora, ogni sovrapposizione  $\alpha|x\rangle + \beta|y\rangle$ , dove  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ , è uno stato permesso del sistema quantistico.

Per sistemi composti, se  $|A\rangle$  è uno stato del sistema  $A$  e  $|B\rangle$  è uno stato del sistema  $B$ , deve esistere un corrispondente stato, denotato con  $|A\rangle|B\rangle$ , del sistema totale  $AB$ . Applicando il Principio di Sovrapposizione per produrre uno stato di quella forma, si intuisce l'utilità del prodotto tensoriale utilizzato in precedenza.

Si considerino un sistema quantistico con spazio degli stati  $Q$  e uno con spazio degli stati  $M$ , che possiede una base ortonormale  $|m\rangle$ .

Sia  $|0\rangle$  uno stato fissato di  $M$  e sia  $\sum M_m^\dagger M_m = I_Q$ , dove  $M_m$  sono operatori su  $Q$ , si definisce un operatore  $U$  come:

$$U|\psi\rangle|0\rangle \equiv \sum_m M_m|\psi\rangle|m\rangle \quad (3.16)$$

Usando l'ortonormalità di  $|m\rangle$  e la relazione di completezza, è possibile verificare che  $U$  conserva il prodotto interno tra stati di forma  $|\psi\rangle|0\rangle$ :

$$\langle\varphi|\langle 0|U^\dagger U|\psi\rangle|0\rangle = \sum_{m,m'} \langle\varphi|M_m^\dagger M_{m'}|\psi\rangle\langle m|m'\rangle = \sum_m \langle\varphi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle \quad (3.17)$$

Supponendo ora di effettuare una misura di proiezione descritta da  $P_m \equiv I_Q \otimes |m\rangle\langle m|$ , la probabilità di avere come risultato  $m$  è:

$$\begin{aligned} p(m) &= \langle\psi|\langle 0|U^\dagger P_m U|\psi\rangle|0\rangle \\ &= \sum_{m',m''} \langle\psi|M_{m'}^\dagger\langle m'|(I_Q \otimes |m\rangle\langle m|)M_{m''}|\psi\rangle|m''\rangle \\ &= \langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle \end{aligned} \quad (3.18)$$

Pertanto, lo stato del sistema totale  $Q \otimes M$  dopo le misure è dato da:

$$\frac{P_m U|\psi\rangle|0\rangle}{\sqrt{\langle\psi|U^\dagger P_m U|\psi\rangle}} = \frac{M_m|\psi\rangle|m\rangle}{\sqrt{\langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle}} \quad (3.19)$$

da cui segue che lo stato del sistema  $M$ , a seguito della misura, è  $|m\rangle$  mentre, lo stato di  $Q$  è  $\frac{M_m|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle}}$ .

## 3.2 Informazione e Computazione Quantistica

### 3.2.1 Quantum Bit

Il concetto alla base del calcolo quantistico è il *quantum bit* o *qubit*, che risulta essere un sistema quantistico (vettore unitario) descritto da uno spazio di Hilbert bidimensionale, generato quindi da due vettori  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , detti anche *base computazionale*.

La realizzazione di un qubit può presentarsi, ad esempio, come le due diverse polarizzazioni di un fotone, come l'allineamento di una rotazione nucleare in un campo magnetico uniforme o, ancora, come due stati di un elettrone in orbita attorno a un singolo atomo. È inoltre possibile fare una combinazione lineare degli stati:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (3.20)$$

dove  $\alpha$  e  $\beta$  sono numeri complessi.

La probabilità di avere come risultato 0 o 1, è data rispettivamente da  $|\alpha|^2$  e  $|\beta|^2$ , dove  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ , ovvero deve essere soddisfatta la condizione di normalizzazione.

La differenza tra bit classico e qubit quantistico risiede nel fatto che, mentre un bit può essere paragonato a una moneta, a cui corrispondono due possibilità di stati (in quanto quelli intermedi vengono trascurati nel caso ideale), un qubit può esistere in tutti gli stati compresi tra  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ . Ad esempio, un qubit può esistere nello stato  $\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ , che può dare come risultato 0 con probabilità  $|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2$ , o 1 con  $|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2$ . Tale stato è anche denotato con  $|+\rangle$ .

Nel modello atomico, l'elettrone può esistere in due stati: lo stato fondamentale e gli stati eccitati, chiamati rispettivamente  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ . Fornendo all'atomo una energia appropriata, per un certo lasso di tempo, è possibile far muovere l'elettrone dallo stato fondamentale allo stato eccitato, e viceversa. Riducendo il tempo in cui viene fornita energia, l'elettrone, che si trovava inizialmente allo stato  $|0\rangle$ , può essere spostato in uno stato  $|+\rangle$  compreso tra  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ .

Tornando alla rappresentazione geometrica del qubit, poichè vale la condizione di normalizzazione, è possibile scrivere lo stato come:

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} \left( \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \right) \quad (3.21)$$

dove  $\theta$ ,  $\varphi$  e  $\gamma$  sono numeri reali e il fattore  $e^{i\gamma}$  rappresenta una fase totale che può essere rimossa, perchè risulta essere un effetto non osservabile.

È possibile riscrivere la formula precedente come:

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \quad (3.22)$$

dove  $\theta \in [0, \pi]$  e  $\varphi \in [0, 2\pi]$  definiscono un punto su una sfera di raggio unitario, detta *sfera di Bloch*, che rappresenta un mezzo utile per visualizzare lo stato di un singolo qubit.

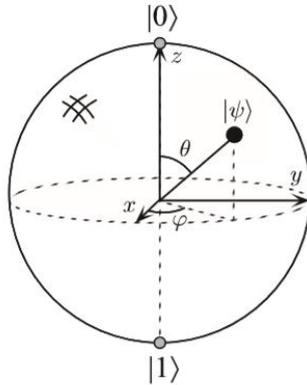


Figura 3.1: Sfera di Bloch [2]

È importante notare che la misura di un qubit cambia lo stato stesso del qubit, facendolo collassare dalla sovrapposizione di  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  allo stato corrispondente al risultato della misurazione.

Considerando un sistema di due qubit, allora, si avranno 4 vettori che formano la base computazionale denotati con  $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ , appartenenti allo spazio di Hilbert  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . È possibile anche considerare la sovrapposizione, per i due qubit, dei quattro stati:

$$|\psi'\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle \quad (3.23)$$

e come per il caso del singolo qubit, i risultati delle misure (00, 01, 10, 11) si verificano con probabilità  $|\alpha_x|^2$ , dove lo stato del qubit dopo la misura risulta essere  $|x\rangle$ , inoltre deve essere verificata la condizione di normalizzazione  $\sum_{x \in \{0,1\}^2} |\alpha_x|^2 = 1$ .

Un'altra base utilizzata è la *base di Bell*, costituita da quattro vettori:

$$\begin{aligned} |\alpha_{00}\rangle &= \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\alpha_{01}\rangle &= \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\alpha_{10}\rangle &= \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\alpha_{11}\rangle &= \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (3.24)$$

### 3.2.2 Calcolo Quantistico

I computer classici sono costituiti da porte logiche che manipolano le informazioni ricevute (bit), trasformandoli in bit in uscita.

Le operazioni effettuate dai gate logici sono definite nelle *tavole di verità* in cui, ad esempio, per una porta NOT si può osservare come allo stato logico in entrata 0, corrisponda uno stato logico in uscita 1, e viceversa (quindi gli stati 0 e 1 sono interscambiabili). Considerando processi con stati  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , o viceversa, è possibile trovare un analogo quantistico per il gate NOT, specificando cosa accade alla combinazione lineare degli stati stessi, ovvero se in entrata si ha la sovrapposizione  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ , in uscita si avrà il qubit  $\alpha'|0\rangle + \beta'|1\rangle$ .

Per rappresentare la porta NOT quantistica è possibile utilizzare la matrice  $2 \times 2$ :

$$X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

che è anche possibile scrivere come:

$$X \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

Pertanto, si ha un'unica condizione sulla matrice che descrive il gate quantistico, ovvero deve valere  $X^\dagger X = 1$ , dove  $X$  è la matrice che descrive il qubit e  $X^\dagger$  la sua aggiunta.

Un altro importante esempio è dato dal gate di Hadamard:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

che, considerando la sfera di Bloch, è facile osservare come l'operazione di Hadamard sia una rotazione della sfera attorno all'asse  $y$  di  $90^\circ$ , seguita da una rotazione attorno all'asse  $x$  di  $180^\circ$ .

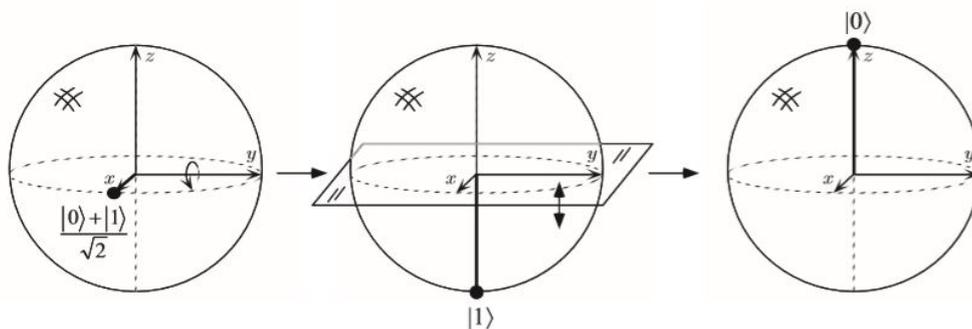


Figura 3.2: Azione del gate di Hadamard sulla sfera di Bloch [3]

È importante osservare che, come in fisica classica è possibile determinare ogni operazione mediante una combinazione di porte NAND, in fisica quantistica è possibile fare ciò combinando dei gate a singolo qubit e il gate a due qubit (CNOT). Pertanto la porta

quantistica CNOT agisce come:

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle; |01\rangle \rightarrow |01\rangle; |10\rangle \rightarrow |11\rangle; |11\rangle \rightarrow |10\rangle \quad (3.28)$$

ed è descritta dalla matrice:

$$U_{CN} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.29)$$

per cui vale  $U_{CN}^\dagger U_{CN} = I$ .

# Capitolo 4

## Random Walk Quantistico

In questo capitolo si studierà il random walk quantistico, facendo una distinzione tra il caso a tempo discreto e a tempo continuo. In ogni sezione ci sarà un confronto tra il caso classico e quello quantistico, sottolineando le differenze tra i due.

Di seguito verranno fornite alcune definizioni, utili nei paragrafi successivi, presentate nell'articolo di J. Kempe [4].

Si immagini una particella posta su una retta, la cui posizione è descritta dalla funzione d'onda  $|\psi_{x_0}\rangle$ . È possibile rappresentare la traslazione della particella, dopo uno step di lunghezza  $l$ , mediante l'operatore unitario  $U_l = \exp(-iPl/\hbar)$ , dove  $P$  è l'operatore momento, tale per cui  $U_l|\psi_{x_0}\rangle = |\psi_{x_0-l}\rangle$ .

Assumendo che la particella abbia spin- $\frac{1}{2}$ , è utile rappresentare l'operatore di spin  $S_z$  denotando gli autostati con  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ , così che  $S_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$  e  $S_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$ .

Considerando  $\hbar = 1$ , si ha che la particella è descritta da:

$$|\Psi\rangle = \alpha^\uparrow|\uparrow\rangle \otimes |\psi^\uparrow\rangle + \alpha^\downarrow|\downarrow\rangle \otimes |\psi^\downarrow\rangle \quad (4.1)$$

dove la prima parte è la componente della funzione d'onda della particella nello spazio di spin- $|\uparrow\rangle$  e la seconda parte è la componente nello spazio di spin- $|\downarrow\rangle$ . Deve valere la condizione di normalizzazione  $|\alpha^\uparrow|^2 + |\alpha^\downarrow|^2 = 1$ .

Lo sviluppo temporale corrispondente alla traslazione, pari ad  $l$ , della particella di spin- $\frac{1}{2}$ , può essere descritto dall'operatore unitario  $U = \exp(-2iS_z \otimes Pl)$ .

Tale operatore induce una traslazione della particella dipendente dal grado di libertà di spin interno. Ovvero, se lo spin della particella si trova inizialmente nello stato  $|\uparrow\rangle$ , così che la sua funzione d'onda abbia la forma  $|\uparrow\rangle \otimes |\psi_{x_0}^\uparrow\rangle$ , allora applicando  $U$  si trasforma in  $|\uparrow\rangle \otimes |\psi_{x_0-l}^\uparrow\rangle$  e la particella risulta spostata verso sinistra di una quantità pari ad  $l$ .

Se invece, lo spin della particella si trova in  $|\downarrow\rangle$  e la funzione d'onda risulta essere  $|\downarrow\rangle \otimes |\psi_{x_0}^\downarrow\rangle$ , applicando  $U$  si ha una traslazione verso destra, di una quantità  $l$ , della particella e la funzione d'onda diventa  $|\downarrow\rangle \otimes |\psi_{x_0+l}^\downarrow\rangle$ .

Un altro importante comportamento si osserva quando lo stato di spin iniziale della

particella, posta in  $x_0$ , non è in un autostato di  $S_z$ , ma in:

$$|\Psi_{in}\rangle = (\alpha^\uparrow |\uparrow\rangle + \alpha^\downarrow |\downarrow\rangle) \otimes |\psi_{x_0}\rangle \quad (4.2)$$

Applicando l'operatore  $U$  si trova:

$$U|\Psi_{in}\rangle = \alpha^\uparrow |\uparrow\rangle \otimes |\psi_{x_0-l}\rangle + \alpha^\downarrow |\downarrow\rangle \otimes |\psi_{x_0+l}\rangle \quad (4.3)$$

Se, a questo punto, si vuole misurare lo spin in  $S_z$ , la particella sarà o nello stato  $|\uparrow\rangle \otimes |\psi_{x_0-l}^\uparrow\rangle$ , localizzata attorno  $x_0+l$  con probabilità  $p^\uparrow = |\alpha^\uparrow|^2$  oppure in  $|\downarrow\rangle \otimes |\psi_{x_0+l}^\downarrow\rangle$ , localizzata attorno  $x_0-l$  con probabilità  $p^\downarrow = |\alpha^\downarrow|^2$ .

Tale procedura corrisponde a un random walk della particella su una linea, e dopo uno step si ha spostamento medio pari a  $l(p^\uparrow - p^\downarrow)$ .

Ripetendo il processo  $T$  volte si trova che la particella sarà spostata in media di una quantità  $\langle x \rangle = Tl(p^\uparrow - p^\downarrow) = Tl(|\alpha^\uparrow|^2 - |\alpha^\downarrow|^2)$  e la varianza della distribuzione sulla linea risulta essere  $\sigma^2 = 4Tl|\alpha^\uparrow|^2|\alpha^\downarrow|^2 = 4Tl^2p^\uparrow p^\downarrow$ , che è ciò che si ottiene se la particella esegue un random walk su una linea.

È possibile misurare lo spin in una base ruotata, data dai vettori ortogonali  $\{|s_+\rangle, |s_-\rangle\}$ , o ruotando lo spin di un angolo  $\theta$  prima di misurarlo in  $S_z$ .

È possibile scrivere  $S_z$  come:

$$S_z = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) \quad (4.4)$$

Una generica rotazione dello spin è descritta dalla matrice:

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

## 4.1 Random Walk Quantistico nel Discreto

Si descrive inizialmente il modello mono-dimensionale.

Sia  $\mathcal{H}_p$  lo spazio di Hilbert, se si considera una linea di lunghezza unitaria, allora, lo spazio sarà costituito dalla base di stati  $\{|i\rangle : i \in \mathbf{Z}\}$  mentre, se si considera una circonferenza si avrà  $\mathcal{H}_p = \{|i\rangle : i = 0 \dots N-1\}$  con  $|i\rangle$  corrispondente a una particella localizzata in posizione  $i$ .

Facendo il prodotto dei gradi di libertà di posizione con quelli di spin, ovvero dello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}_p$  con lo spazio  $\mathcal{H}_c$ , di base  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ , si ottiene lo spazio del sistema totale di stati  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_c \otimes \mathcal{H}_p$ .

La condizione di traslazione di un sito può pertanto essere espressa da:

$$S = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes \sum_i |i+1\rangle\langle i| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes \sum_i |i-1\rangle\langle i| \quad (4.6)$$

dove  $i \in \mathbf{Z}$  nel caso della retta o  $0 \leq i \leq N - 1$  nel caso della circonferenza.  $S$  trasforma gli stati della base  $|\uparrow\rangle \otimes |i\rangle$  in  $|\uparrow\rangle \otimes |i+1\rangle$  e  $|\downarrow\rangle \otimes |i\rangle$  in  $|\downarrow\rangle \otimes |i-1\rangle$ .

Il primo step del random walk consiste in una rotazione nello spazio  $\mathcal{H}_c$ , anche detto coin-space. Si assuma che lo stato iniziale del random walk sia posizionato allo stato  $|0\rangle$  mentre lo stato “c” risulta in  $|\uparrow\rangle$ , si ha che dopo una iterazione si vuole uno spostamento verso destra ( $|1\rangle$ ) con probabilità pari a  $\frac{1}{2}$  e uno step verso sinistra ( $|-1\rangle$ ) con uguale probabilità.

È possibile utilizzare Hadamard (3.27) e osservare che:

$$|\uparrow\rangle \otimes |0\rangle \xrightarrow{H} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \otimes |0\rangle \xrightarrow{S} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |1\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |-1\rangle) \quad (4.7)$$

Misurare lo stato della moneta nella base standard fornisce  $\{|\uparrow\rangle \otimes |1\rangle, |\downarrow\rangle \otimes |-1\rangle\}$  con probabilità  $1/2$ . Dopo questa misurazione non c'è alcuna correlazione tra le posizioni rimaste. Se si continua il random walk considerando, ad ogni iterazione, questo tipo di misurazione, si ottiene un semplice random walk classico su una retta (o una circonferenza), rappresentato dalla tavola di Galton:

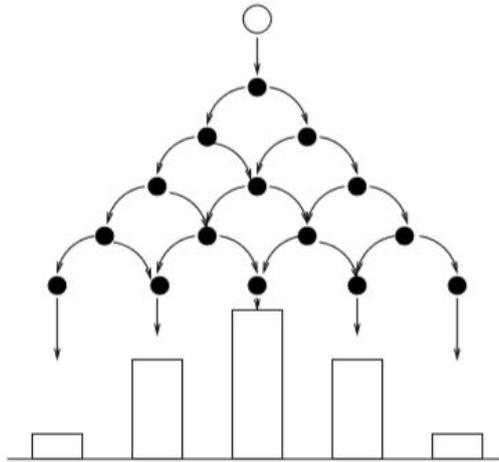


Figura 4.1: Tavola di Galton [4]

La sua distribuzione limite sulla retta (per un numero elevato di iterazioni  $T$ ) si avvicina ad una Distribuzione Gaussiana con media nulla e varianza  $\sigma^2 = T$  (sulla circonferenza la distribuzione si avvicina alla distribuzione uniforme).

Nel caso del random walk quantistico si considereranno le correlazioni quantistiche tra posizioni differenti e verranno fatte interferire in step successivi. Questa interferenza causerà un comportamento diverso del random walk. In particolare si osserverà che la distribuzione sulla retta non approssimerà una Gaussiana e la varianza non sarà lineare. Il random walk quantistico, corrispondente a  $T$  step, è definito dalla trasformazione  $U^T$ , dove  $U$  è dato da:

$$U = S \cdot (H \otimes I) \quad (4.8)$$

Considerando lo stato iniziale  $|\Phi_{in}\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |0\rangle$  si ha:

$$\begin{aligned}
 |\Phi_{in}\rangle &\xrightarrow{U} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |1\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |-1\rangle) \\
 &\xrightarrow{U} \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle \otimes |2\rangle - (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \otimes |0\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |-2\rangle) \\
 &\xrightarrow{U} \frac{1}{2\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |3\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |1\rangle + |\uparrow\rangle \otimes |-1\rangle - 2|\downarrow\rangle \otimes |-1\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |-3\rangle)
 \end{aligned}
 \tag{4.9}$$

Pertanto, il random walk quantistico induce una distribuzione di probabilità asimmetrica sulle posizioni (è un “drifting” verso sinistra) come si osserva in **Tabella 1**.

**Tabella 1:** Probabilità di essere nella posizione  $i$  dopo  $T$  step

T <sub>1</sub>	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
0						1					
1					$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$				
2				$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{4}$				
3			$\frac{1}{8}$	$\frac{5}{8}$	$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}$			
4		$\frac{1}{16}$		$\frac{5}{8}$	$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{16}$		
5	$\frac{1}{32}$		$\frac{17}{32}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{1}{8}$		$\frac{5}{32}$		$\frac{1}{32}$

Tale asimmetria deriva dal fatto che Hadamard tratta  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  in modo differente, infatti, moltiplica la fase per -1 solo nel caso di  $|\downarrow\rangle$ . Ciò induce ulteriori cancellazioni per i percorsi che vanno verso destra (interferenza distruttiva), mentre le particelle che si spostano verso sinistra interferiscono in modo costruttivo.

Per ottenere una distribuzione simmetrica si deve considerare l’inizio del random walk in una sovrapposizione di  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  e assicurarsi che il drift di questi non interferisca con nient’altro.

Un altro modo per eliminare l’asimmetria potrebbe essere quello di considerare:

$$Y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}
 \tag{4.10}$$

in cui  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$  sono trattati allo stesso modo.

La distribuzione di probabilità di Hadamard, avendo considerato le condizioni iniziali simmetriche, risulta essere:

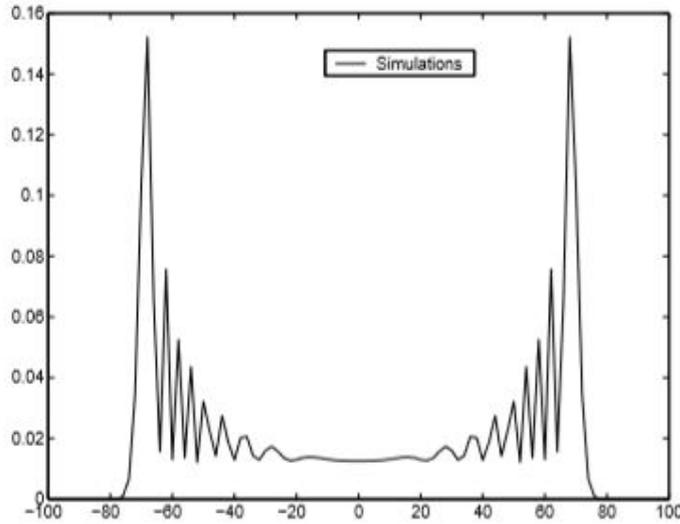


Figura 4.2: Distribuzione di probabilità di Hadamard con condizione iniziale simmetrica [4]

Ora la varianza del random walk quantistico risulta essere  $\sigma^2 \sim T^2$  pertanto, si propaga più velocemente.

Un altro aspetto importante è il fatto che, diversamente dal caso classico, il random walk di Hadamard, il cui “confine assorbente” si trova in  $|0\rangle$ , ha una data probabilità di riuscire ad uscire dallo stato iniziale  $|\uparrow\rangle \otimes |1\rangle$ .

La probabilità di essere assorbito in  $|0\rangle$  è  $p_{quantum} = 2/\pi$  che fornisce una probabilità di fuga dall’origine pari a  $\approx 0.36338$ .

Questo comportamento è generale poichè, per diversi stati iniziali e distanza dal confine, il valore numerico per la probabilità di assorbimento varia ma, la probabilità di fuga è diversa da zero e infinita in ogni caso.

È possibile generalizzare il caso del random walk su una linea, al caso di “grafici generali” in più dimensioni.

Si consideri un grafico regolare, con vertici dello stesso tipo e di grado  $d$  e si etichettino con  $j \in 1 \dots d$  i lati corrispondenti. Lo stato associato a un vertice  $v$ , che punta al lato  $j$ , è  $|j\rangle \otimes |v\rangle$ .

È quindi possibile definire l’operazione di shift,  $S$ , come:

$$S|j\rangle \otimes |v\rangle = \begin{cases} |j\rangle \otimes |w\rangle & \text{se } e_v^j = (v, w) \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (4.11)$$

dove  $S$  muove la particella da  $v$  a  $w$  se il lato  $(v, w)$  è etichettato da  $j$  su  $v$ .

Se il grafico non è regolare, cioè se i vertici hanno vari gradi, è possibile aggiungere dei self-loops a ciascun vertice di grado inferiore a  $d$  (essendo  $d$  il grado massimo) includendoli nell’etichettatura (con la stessa etichetta su entrambe le estremità). Lo spostamento

applicato manterrà il random walk sul posto.

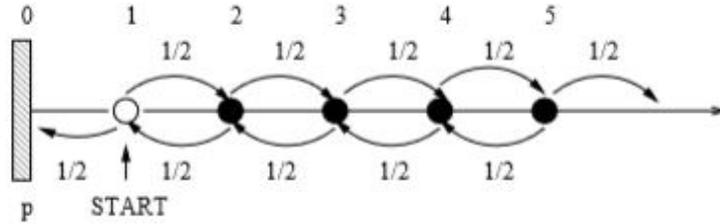


Figura 4.3: Self-loop con punto di assorbimento posto all'origine [4]

## 4.2 Random Walk Quantistico nel Continuo

Per il random walk quantistico nel continuo si considera solo lo spazio  $\mathcal{H}_p$ . L'idea alla base di tale modello deriva dalla teoria delle *Catene di Markov*.

Uno spostamento, nel caso del random walk classico, può essere descritto da una matrice  $M$ , che trasforma la distribuzione di probabilità su  $V$  (essendo  $V$  set di vertici). Gli  $M_{i,j}$  forniscono la probabilità di spostarsi da  $i$  a  $j$  in un solo step.

Definendo con  $\vec{p}^t = (p_1^t, \dots, p_{|V|}^t)$  la distribuzione di probabilità sui vertici di  $V$ , al tempo  $T$ , si ha:

$$p_i^{t+1} = \sum_j M_{i,j} p_j^t \quad (4.12)$$

ovvero  $\vec{p}_{t+1} = M\vec{p}_t$ . Pertanto, la probabilità di andare da  $i$  a  $j$  è data da  $1/d_i$ , dove  $d_i$  è il grado di  $i$ .

Il processo dato iterando  $M$  trasforma lo stato in tempi interi. Per rendere il processo continuo nel tempo, si assume che le transizioni possano avvenire in ogni momento e che la velocità di spostamento da un vertice al suo vicino sia data da  $\gamma$  (una costante fissa indipendente dal tempo). Quindi, le transizioni tra i nodi vicini si verificano con probabilità  $\gamma$  per unità di tempo.

La matrice  $H$  che genera tale processo è data da:

$$H_{i,j} = \begin{cases} -\gamma & i \neq j, i \text{ e } j \text{ connessi} \\ 0 & i \neq j, i \text{ e } j \text{ non connessi} \\ d_i \gamma & i = j \end{cases}$$

(4.13)

Se  $p_i(t)$  denota la probabilità di essere nel vertice  $i$  al tempo  $t$ , allora è possibile definire la transizione con:

$$\frac{dp_i(t)}{dt} = - \sum_j H_{i,j} p_j(t) \quad (4.14)$$

la cui soluzione è  $\vec{p}(t) = \exp(-Ht)\vec{p}(0)$ .

Farhi e Gutmann ebbero l'idea di portare questa costruzione anche al caso quantistico. La matrice  $H$  è ora considerata come l'Hamiltoniana del processo che genera un'evoluzione  $U(T)$ :

$$U(t) = \exp(-iHt) \quad (4.15)$$

Pertanto, se si è posizionati in uno stato iniziale  $|\Psi_{in}\rangle$ , e questo evolve sotto  $U$  per un tempo  $T$  e si misurano le posizioni dello stato risultante, si ottiene una distribuzione di probabilità sui vertici del grafico.

Un'ulteriore differenza tra i random walk classico e quantistico consiste nel tempo di raggiungimento di alcuni nodi, per esempio in un diagramma,  $G_n$ , di questo tipo:

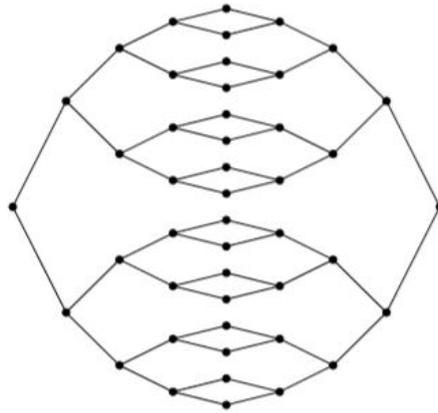


Figura 4.4: Due “alberi binari” di  $n = 4$  livelli, diramati in modo simmetrico [4]

Il tempo di raggiungimento previsto tra due punti  $S$  e  $T$  in un grafico è il tempo impiegato in media per raggiungere  $T$  a partire da  $S$ .

Si considera l'inizio del random walk alla radice dell'albero di sinistra. Si ricerca la probabilità di raggiungere la radice dell'altro albero (a destra) in funzione del tempo. Nel caso del random walk classico i vertici di  $G_n$  possono essere raggruppati in colonne indicizzate da  $j \in \{0, 1, \dots, 2n\}$ . La colonna 0 contiene la radice dell'albero di sinistra, la colonna 1 contiene i due vertici connessi a quella radice, e così via.

È importante notare che la colonna  $n$  contiene i  $2n$  vertici nel mezzo del grafico e la colonna  $2n$  è la radice a destra. La simmetria consente di ricondurla a un random walk su una retta.

Nell'albero di sinistra, per  $0 < j < n$ , la probabilità di passare dalla colonna  $j$  alla colonna  $j + 1$  è il doppio rispetto alla probabilità di passare dalla colonna  $j$  alla colonna  $j - 1$ . Tuttavia, nell'albero giusto, per  $n < j < 2n$ , la probabilità di passare dalla colonna  $j$  alla colonna  $j + 1$  è la metà della probabilità di passare dalla colonna  $j$  alla colonna  $j - 1$ .

Pertanto, a partire dalla colonna 0, la probabilità di essere nella colonna  $2n$  dopo un numero qualsiasi di passaggi è inferiore a  $2 - n$ . Quindi la probabilità di raggiungere la colonna  $2n$  in un tempo, polinomiale in  $n$ , risulta esponenzialmente piccola in funzione di  $n$ .

Si consideri ora il caso del random walk quantistico su  $G_n$ , iniziando nello stato corrispondente alla radice sinistra e evolvendo con l'Hamiltoniana (4.12).

In questo stato iniziale, le simmetrie di  $H$  mantengono l'evoluzione in un sottospazio  $(2n + 1)$ -dimensionale dello spazio di Hilbert  $(2^{n+1} + 2^n - 2)$ -dimensionale. Questo sottospazio è generato dagli stati:

$$|\tilde{j}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_j}} \sum_a |a\rangle \quad (4.16)$$

dove

$$N_j = \begin{cases} 2^j & 0 \leq j \leq n \\ 2^{2n-j} & n \leq j \leq 2n \end{cases} \quad (4.17)$$

In tale base, gli elementi di  $H$  non nulli sono:

$$\langle \tilde{j} | H | \tilde{j} \pm 1 \rangle = -\sqrt{2}\gamma \quad (4.18)$$

$$\langle \tilde{j} | H | \tilde{j} \rangle = \begin{cases} 2\gamma & j = 0, n, 2n \\ 3\gamma & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (4.19)$$

Un primo metodo per risolvere questo problema potrebbe essere quello di approssimare il random walk sulla linea finita al caso di una retta infinita e omogenea, estendendo l'Hamiltoniana e sostituendo le entrate diagonali.

La velocità di propagazione del random walk sulla linea omogenea infinita è lineare nel tempo  $T$ .

Tale random walk a tempo discreto mostra un comportamento estremamente simile a quello a tempo continuo.

# Elenco delle figure

2.1	Distribuzione Gaussiana a vari istanti di tempo . . . . .	15
3.1	Sfera di Bloch [2] . . . . .	30
3.2	Azione del gate di Hadamard sulla sfera di Bloch [3] . . . . .	31
4.1	Tavola di Galton [4] . . . . .	35
4.2	Distribuzione di probabilità di Hadamard con condizione iniziale simmetrica [4] . . . . .	37
4.3	Self-loop con punto di assorbimento posto all'origine [4] . . . . .	38
4.4	Due "alberi binari" di $n = 4$ livelli, diramati in modo simmetrico [4] . . . . .	39

# Bibliografia

- [1] A. Nielsen, I. L. Chuang (2010), *Quantum Computation and Quantum Information*
- [2] A. Nielsen, I. L. Chuang (2010), *Quantum Computation and Quantum Information*, pg. 15
- [3] A. Nielsen, I. L. Chuang (2010), *Quantum Computation and Quantum Information*, pg.19
- [4] J. Kempe (2003), *Quantum random walks-an introductory overview*, in “arXiv”
- [5] J. Kempe (2003), *Quantum random walks-an introductory overview*, in “arXiv”, pg. 10
- [6] J. R. Taylor (1982), *An Introduction to Error Analysis*
- [7] K. Huang (2002), *Introduction to Statistical Physics*
- [8] K. Huang (2002), *Introduction to Statistical Physics*, pg. 264
- [9] K. Huang (2002), *Introduction to Statistical Physics*, pg. 261
- [10] L. E. Reichl (1998), *A Modern Course in Statistical Physics*
- [11] L. E. Reichl (1998), *A Modern Course in Statistical Physics*, pg. 206
- [12] N. G. Van Kampen (2007), *Stochastic processes in Physics and Chemistry*, pg. 78
- [13] P. Fornasini (2008), *The Uncertainty in Physical Measurements*