

**UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA – UDESC
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

JOÃO PEDRO ENGSTER

**TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS EM GRAFOS VIA CAMINHADAS QUÂNTICAS
CONTÍNUAS NO TEMPO**

JOINVILLE

2021

JOÃO PEDRO ENGSTER

**TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS EM GRAFOS VIA CAMINHADAS QUÂNTICAS
CONTÍNUAS NO TEMPO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Tecnológicas da Universidade do Estado de Santa Catarina, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Edgard Pacheco Moreira Amorim

**JOINVILLE
2021**

**Ficha catalográfica elaborada pelo programa de geração automática da
Biblioteca Setorial do CCT/UDESC,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)**

Engster, João Pedro
Transferência de estado em grafos via caminhadas quânticas
contínuas no tempo / João Pedro Engster. -- 2021.
58 p.

Orientador: Edgard Pacheco Moreira Amorim
Dissertação (mestrado) -- Universidade do Estado de Santa
Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, Programa de
Pós-Graduação em Física, Joinville, 2021.

1. Caminhadas quânticas. 2. Grafos. 3. Estados deslocalizados.
4. Transferência de estados. I. Amorim, Edgard Pacheco Moreira. II.
Universidade do Estado de Santa Catarina, Centro de Ciências
Tecnológicas, Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

JOÃO PEDRO ENGSTER

**TRANSFERÊNCIA DE ESTADOS EM GRAFOS VIA CAMINHADAS QUÂNTICAS
CONTÍNUAS NO TEMPO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Tecnológicas da Universidade do Estado de Santa Catarina, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Edgard Pacheco Moreira Amorim

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Edgard Pacheco Moreira Amorim, Dr.
Universidade do Estado de Santa Catarina (presidente/orientador)

Membros:

Prof. Fernando Deeke Sasse, Dr.
Universidade do Estado de Santa Catarina

Prof. Eduardo Inácio Duzzioni, Dr.
Universidade Federal de Santa Catarina

Joinville, 12 de novembro de 2021

Para minha família.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço à minha mãe, Nélia, e ao meu pai, Jairo, por todo o apoio, incentivo, ajuda e ensinamentos que me têm fornecido desde o dia em que vim ao mundo.

Agradeço a minha irmã e melhor amiga, Maria Paula, pelos incontáveis momentos lindos que vivemos e ainda viveremos juntos, mas, principalmente, por me inspirar (e ensinar) a ser uma pessoa melhor.

Ao meu primo e comadre, Marcelo, pela referência que sempre foi para mim.

Agradeço em especial ao meu orientador, professor Edgard, por toda a paciência, ensinamentos e boas conversas que tivemos nos últimos anos, e por me mostrar que tipo de físico e professor almejo ser.

Ao sempre prestativo Sidnei, secretário do PPGF, pelo auxílio em diversos momentos nos últimos anos.

Ao Adriano, pelo companheirismo que construímos. Foi incrível ser seu aluno, e é muito melhor ser seu amigo.

Ao Felipe, pela parceria e infinidáveis conversas madrugadas adentro. Dividir uma casa contigo por sete anos, foi, sem dúvida, uma das experiências mais marcantes que vivi.

Ao Gerson, pelos mais de dezenove anos de amizade e muitos outros que ainda virão.

A todos os professores e professoras que me incentivaram a trilhar este caminho. Seja na escola, na música, graduação, pós-graduação ou como colegas de trabalho, vocês com certeza são exemplos para mim.

Aos alunos e alunas que, mesmo sem saber, me ensinaram muito nos últimos anos. Vocês foram fundamentais em minha construção como professor.

Ao eterno maestro Andre Matos (*in memoriam*), por fazer a trilha sonora da minha vida.

RESUMO

Quando um estado quântico se espalha por uma rede de posições discretas, em certas circunstâncias é possível que este se recomponha em outra região da rede, fenômeno chamado de transferência de estado. Neste trabalho, investigamos a transferência de estado a partir de caminhadas quânticas contínuas no tempo em grafos circulares C_n . Descobrimos que estados iniciais dados por uma superposição de estados de posição que obedece uma distribuição estatística, cuja dispersão inicial é suficientemente grande, possuem transferência de estado e periodicidade com alta fidelidade, mesmo em grafos grandes ($n \geq 100$). A fidelidade melhora à medida que o estado inicial se aproxima de uma distribuição Gaussiana. Identificamos os principais aspectos da geometria da distribuição do estado inicial que otimizam a transferência de estado e encontramos uma expressão analítica para calcular a densidade de probabilidade de um estado Gaussiano ao longo do tempo para diferentes tamanhos do grafo C_n .

Palavras-chave: Caminhadas quânticas; Grafos; Estados deslocalizados; Transferência de estados.

ABSTRACT

When a quantum state spreads on a lattice of discrete positions, under certain circumstances it is possible that it recomposes itself in another region of the lattice, phenomenon called state transfer. In this work, we investigate the state transfer through continuous-time quantum walks on circular graphs C_n . We find out that initial states given by a superposition of position states which obeys a statistical distribution, whose initial dispersion is large enough, have state transfer and periodicity with high fidelity even in large graphs ($n \geq 100$). The fidelity improves as the initial state approximates a Gaussian distribution. We identify the main aspects of the initial state distribution geometry that optimize the state transfer and we find an analytical expression to calculate the probability density of a Gaussian state over time for different sizes of the graph C_n .

Keywords: Quantum walks; Graphs; Delocalized states; State transfer.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Exemplo de caminhadas aleatórias nos casos clássico e quântico. Enquanto no caso clássico o caminhante possui posições bem determinadas após cada passo, no caso quântico, até ser realizada uma medida, o caminhante existe numa superposição de estados, ocupando mais de uma posição simultaneamente. Figura extraída de (MACIEL, 2018).	14
Figura 2 – Exemplos de grafos que apresentam transferência perfeita de estado. À esquerda, o grafo K_2 , o menor da família dos grafos completos K_n ; no centro o grafo C_4 , da família dos grafos circulares C_n ; e, à direita, o hipercubo de dimensão 3, da família Q_n . Todos estes apresentam transferência de um estado local para o vértice antipodal, ou seja, o mais distante do vértice inicial.	15
Figura 3 – As sete pontes de Königsberg (atual Kaliningrado), conectando as quatro faixas de terra, como em 1736. Figura extraída de (NUMBERPHILE, 2016).	18
Figura 4 – Representação em grafo do problema de Königsberg.	18
Figura 5 – Exemplo de grafo com $p = 4$ vértices e $q = 4$ arestas.	19
Figura 6 – Difusão de uma quantidade física ψ por um grafo. Figura extraída de (MACIEL, 2018).	21
Figura 7 – Linha infinita como um grafo.	22
Figura 9 – Grafo K_2 .	28
Figura 8 – Probabilidades de encontrar a partícula nos vértices 1 e 2 do grafo K_2 , para $ \Psi(0)\rangle = 1\rangle$.	28
Figura 10 – Distribuições de probabilidade para a CQCT na linha infinita, partindo de um estado local, nos tempos $t = 2, 5$ e 10 .	31
Figura 11 – Distribuições de probabilidade para a CQCT na linha infinita, partindo de um estado Gaussiano, nos tempos $t = 0, 20$ e 40 .	33
Figura 12 – Dispersão no tempo para os estados local e Gaussianos com dispersão inicial $\sigma_0 = 1, 2, 3$ e 4 .	34
Figura 13 – Grafos C_4 a C_9 , destacando os vértices inicial (Alice) e antipodal (Bob) em vermelho, de acordo com a definição dada pela Eq. 4.11.	37
Figura 14 – Fidelidade do estado no vértice antipodal para grafos C_n com n par de 4 a 10. Os picos das funções apresentadas na figura representam o primeiro máximo local da fidelidade.	38
Figura 15 – Primeiro máximo de probabilidade no vértice antipodal em função do número total de vértices par e ímpar. No detalhe: em escala logarítmica com os respectivos ajustes.	39

Figura 16 – Densidades de probabilidades para distribuições Gaussianas com dispersões $\sigma_0 = 2$ e 5 , respectivamente, nos tempos $t = 0$ (à esquerda) e t^* (à direita) no grafo C_{50} , obtidas a partir do resultado analítico da Eq. 4.18. Quando $\sigma_0 = 2$, $t^* = 204$; já para $\sigma_0 = 5$, $t^* = 200$. À direita notamos a transferência de estado com alta fidelidade para a região antipodal do grafo (denotada por Bob) para $\sigma_0 = 5$ e uma transferência com menor fidelidade quando $\sigma_0 = 2$. As linhas tracejadas, na figura à direita, representam os resultados obtidos via decomposição espectral (Eq. 2.30), em total acordo com a Eq. 4.18.	41
Figura 17 – Fidelidade do estado retangular em função do tempo para dispersões $\sigma_0 = 2$, 5 e 10 , nos grafos C_{40} , C_{70} e C_{100} . Na construção desta figura utilizamos um filtro para reduzir os ruídos das curvas e facilitar a visualização dos picos de fidelidade.	43
Figura 18 – Densidades de probabilidades para estados retangulares com dispersões $\sigma_0 = 2$ e 5 , respectivamente, nos tempos $t = 0$ (à esquerda) e t^* (à direita) no grafo C_{50} . Para $\sigma_0 = 2$, $t^* = 205$; já para $\sigma_0 = 5$, $t^* = 203$. À direita, temos a reconstituição parcial do estado na região antipodal do grafo.	44
Figura 19 – Fidelidade máxima para diferentes tamanhos da rede C_n , partindo de estados retangulares com dispersões $\sigma_0 = 2$, 5 e 10 . Notemos que a curva com $\sigma_0 = 10$ começa a partir de grafos com 40 vértices, pois são necessários 35 vértices para distribuir um estado com esta dispersão (ver Tabela 2).	44
Figura 20 – Fidelidade do estado Gaussiano em função do tempo para dispersões $\sigma_0 = 2$, 3 e 4 , nos grafos C_{50} , C_{70} e C_{100}	46
Figura 21 – Fidelidade máxima para diferentes tamanhos da rede C_n , partindo de estados Gaussianos com dispersões $\sigma_0 = 3$, 4 , 5 e 10 e respectivos ajustes quadráticos (linhas sólidas). Notemos que a curva com $\sigma_0 = 10$ começa a partir de grafos com 100 vértices, pois é necessário um número grande de vértices para distribuir tal estado Gaussiano respeitando a normalização (vide Eq. 4.27).	46
Figura 22 – Fidelidade do estado em função do tempo, partindo de um estado Gaussiano com dispersões iniciais $\sigma_0 = 2$, 5 e 10 , numa rede C_{200} . O pico de fidelidade que ocorre em $t^* = 3187$, corresponde à transferência do estado para a região antipodal. Já o segundo pico para $t = 6374$ representa o retorno do estado à região inicial, demonstrando a periodicidade da caminhada para $\sigma_0 = 10$	48
Figura 23 – Distribuições de probabilidade na rede C_{200} ilustrando evolução da caminhada quântica. No instante inicial todo o estado está centrado em Alice, enquanto no tempo $t^* = 3187$ todo o estado está centrado em Bob, na região antipodal do grafo, representando a transferência de estado.	48

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Distribuição de probabilidades para uma caminhada aleatória clássica em uma dimensão, com os valores de t denotando os passos da caminhada e j as posições.	23
Tabela 2 – Valores aproximados de N para diferentes dispersões σ_0 numa distribuição retangular.	42
Tabela 3 – Distribuições e suas correspondentes variâncias iniciais. Na coluna à esquerda temos a sobreposição de cada distribuição com uma distribuição Gaussiana, todas com dispersão inicial $\sigma_0 = 5$	49

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
1.1	CAMINHADAS ALEATÓRIAS CLÁSSICAS E QUÂNTICAS	13
1.2	ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO	16
2	FUNDAMENTOS TEÓRICOS	17
2.1	BREVE INTRODUÇÃO HISTÓRICA À TEORIA DE GRAFOS	17
2.2	MATRIZ ADJACÊNCIA E LAPLACIANO DE UM GRAFO	19
2.3	PROCESSOS DE MARKOV E CAMINHADAS ALEATÓRIAS CLÁSSICAS	21
2.3.1	Cadeias de Markov de tempo discreto	21
2.3.2	Cadeias de Markov de tempo contínuo	23
2.4	CQCT NO ESPAÇO DE POSIÇÕES	24
2.5	TRANSFERÊNCIA DE ESTADO E FIDELIDADE	26
2.6	CQCT NO ESPAÇO DE MOMENTOS	28
3	CQCT NA LINHA INFINITA	30
3.1	ESTADOS LOCAIS	30
3.2	ESTADOS DESLOCALIZADOS	32
3.3	DISPERSÃO DOS ESTADOS	33
4	CQCT EM GEOMETRIAS CIRCULARES	35
4.1	O GRAFO C_n	35
4.2	ESTADOS LOCAIS	36
4.3	ESTADOS DESLOCALIZADOS	39
4.3.1	Fidelidade para estados deslocalizados	41
4.3.2	Estado Retangular	42
4.3.3	Estado Gaussiano	45
4.3.4	Outras distribuições	48
5	CONCLUSÕES	51
	REFERÊNCIAS	53
	APÊNDICE A – TRANSFORMADAS DE FOURIER, ESPAÇOS DE MOMENTOS E POSIÇÕES	56
	APÊNDICE B – FUNÇÕES DE BESSEL	58

1 INTRODUÇÃO

1.1 CAMINHADAS ALEATÓRIAS CLÁSSICAS E QUÂNTICAS

Imaginemos que uma pessoa, de posse de uma moeda, esteja parada em uma dada posição inicial, e inicia uma caminhada em linha reta, podendo se deslocar para a esquerda ou para a direita. Antes de dar o primeiro passo, ela lança a moeda, e há probabilidades iguais de o resultado da jogada ser cara ou coroa (50% de chances para cada, considerando uma moeda justa). Se o resultado for cara, digamos, o caminhante dá um passo para a direita; se o resultado for coroa, para a esquerda. Assim, condicionamos a caminhada dessa pessoa a um processo aleatório: antes de dar um passo, a moeda é lançada e, a depender do resultado, ela dá um passo para a direita ou para a esquerda. Diante dessa situação, podemos nos perguntar: onde estará o caminhante após um certo número de passos? Como não é possível prever com exatidão qual será a sequência de resultados dos lançamentos da moeda, não podemos responder tal pergunta, porém, a partir da análise combinatória, podemos determinar as probabilidades de o caminhante se encontrar numa posição j após um certo número de passos t , isto é, obter a função densidade de probabilidades $\mathcal{P}(j, t)$. Este exemplo hipotético ilustra o que chamamos de uma caminhada aleatória clássica (em sua versão discreta), problema apresentado pela primeira vez por Pearson em 1905 (PEARSON, 1905), no qual o caminhante é um objeto clássico, ou seja, sujeito às leis da mecânica clássica. O modelo de caminhadas aleatórias clássicas pode ser apresentado no caso contínuo ou discreto, e descreve uma imensa gama de processos que ocorrem em diversas áreas da ciência, tais como biologia (NEIGEL; AVISE, 1993; BERG, 1993b), economia (SCALAS, 2006; MANTEGNA; STANLEY, 2000), matemática (HOSHINO; ICHIDA, 1971; BERG, 1993a; SPITZER, 2013) e física (GENNES, 1979; CEPERLEY; ALDER, 1986; STEWART, 2001; ANTENEODO; MORGADO, 2007).

Em 1993, Aharonov, Davidovich e Zagury propuseram um análogo quântico das caminhadas aleatórias, ou seja, um problema no qual o caminhante seria uma partícula sujeita às leis da mecânica quântica. Deste modo, temos uma caminhada descrita em termos das amplitudes de probabilidades e de um grau de liberdade interno que condiciona a evolução da caminhada (o spin de um elétron ou a polarização de um fóton, por exemplo) (AHARONOV; DAVIDOVICH; ZAGURY, 1993). Este modelo inaugura, portanto, o estudo das *caminhadas aleatórias quânticas*, que posteriormente passaram a ser referidas apenas como *caminhadas quânticas* (CQs). Assim, se numa caminhada aleatória clássica, a cada passo o caminhante possui probabilidades iguais de se deslocar para a esquerda ou para a direita, no caso quântico deve-se levar em conta as interferências construtivas e destrutivas que decorrem da superposição das amplitudes de probabilidades, levando a densidades de probabilidades radicalmente distintas das obtidas numa caminhada clássica (AHARONOV; DAVIDOVICH; ZAGURY, 1993; VENEGAS-ANDRACA, 2012; PORTUGAL, 2013). Podemos visualizar essa ideia na Fig. 1, que compara o caso quântico com o caso clássico.

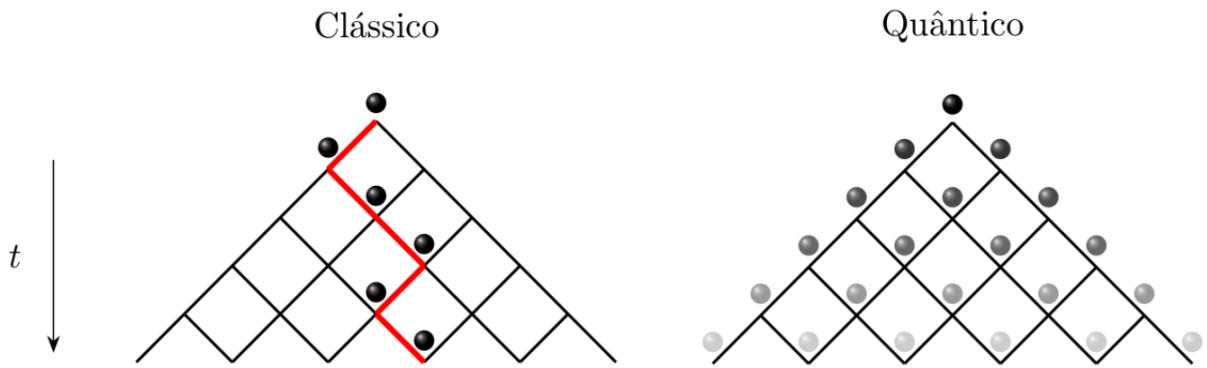


Figura 1 – Exemplo de caminhadas aleatórias nos casos clássico e quântico. Enquanto no caso clássico o caminhante possui posições bem determinadas após cada passo, no caso quântico, até ser realizada uma medida, o caminhante existe numa superposição de estados, ocupando mais de uma posição simultaneamente. Figura extraída de (MACIEL, 2018).

Alguns trabalhos posteriores que se tornaram referências básicas no estudo das CQs devem-se a Kempe (KEMPE, 2003) e Kendon (KENDON, 2007) e, com o crescente interesse pelo estudo das CQs, verificou-se uma gama de aplicações diversas em física, podendo ser utilizadas como algoritmos de busca quântica (SHENVI; KEMPE; WHALEY, 2003), para fazer computação universal (CHILDS, 2009; LOVETT et al., 2010), na simulação de hamiltonianos de Dirac (CHANDRASHEKAR, 2013) e no estudo da oscilação de neutrinos (MOLFETTA; PÉREZ, 2016). Ainda, se o estudo das caminhadas aleatórias clássicas possibilitou diversos avanços em campos distintos da ciência, o mesmo vale para o caso quântico, sendo aplicadas, por exemplo, no estudo da eficiência energética da fotossíntese (ENGEL et al., 2007) e em processos de tomada de decisão humana (BUSEMEYER; TOWNSEND, 2006).

Nas CQs descritas até agora o tempo é tratado como variável discreta (vide Fig. 1), ou seja, a cada passo de tempo alteram-se as probabilidades de encontrarmos a partícula em dada posição, o que seria o análogo de um caminhante clássico dar um passo para a esquerda ou para a direita. Em suma, a evolução de uma caminhada discreta a cada passo de tempo é determinada por um operador que translada a partícula e rotaciona seu spin, num processo sempre condicionado ao estado de spin da partícula no momento da ação do operador (ORTHEY, 2018). Todavia, assim como ocorre no caso clássico, as caminhadas quânticas também possuem uma descrição que lida com o tempo como variável contínua, as chamadas *caminhadas quânticas contínuas no tempo* (CQCTs). Nesse modelo, as CQCTs são descritas como processos de Markov contínuos no tempo (formalismo que será desenvolvido com mais rigor no capítulo seguinte). Nestes processos, o espaço de posições onde se realiza a caminhada é descrito por um conjunto discreto de sítios, os quais chamaremos de vértices. Tais vértices podem estar conectados das mais diversas maneiras, possibilitando múltiplas geometrias diferentes para o espaço de posições. Assim, para cada par de vértices conectados, atribuímos uma aresta (o caminho que a partícula pode percorrer para migrar de um vértice a outro) - a este conjunto de vértices e arestas damos o nome *grafo*. Nos processos de Markov, sistemas ditos sem memória, a evolução do sistema não

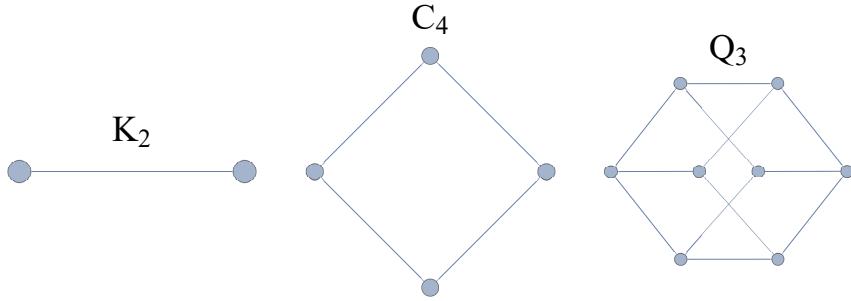


Figura 2 – Exemplos de grafos que apresentam transferência perfeita de estado. À esquerda, o grafo K_2 , o menor da família dos grafos completos K_n ; no centro o grafo C_4 , da família dos grafos circulares C_n ; e, à direita, o hipercubo de dimensão 3, da família Q_n . Todos estes apresentam transferência de um estado local para o vértice antipodal, ou seja, o mais distante do vértice inicial.

depende de seu estado anterior (como ocorre na mecânica newtoniana, por exemplo), de forma que há uma probabilidade de transição por tempo γ entre os vértices, i.e., uma probabilidade de a partícula migrar de um vértice para outro. Assim, o operador hamiltoniano do sistema, que determina a evolução temporal da CQCT, deve ser construído com respeito ao grafo no qual se dará a caminhada. Notamos aqui uma diferença significativa entre os casos discreto e contínuo, uma vez que para as CQCTs não é necessário um operador de evolução que dependa do grau de liberdade interna do caminhante, depende apenas da geometria do problema.

Um dos aspectos centrais da teoria da informação consiste em transmitir e reproduzir a informação da forma mais fiel possível de um ponto a outro numa rede (SHANNON, 1948). No contexto das CQCTs, isso traduz-se em transferir um estado inicial de um vértice do grafo para outro, e neste trabalho caracterizamos estes processos, chamados de transferências de estados, buscando determinar sob quais condições ocorrem e quais fatores afetam a perda de informação ao transferir um estado de um vértice para outro. Com efeito, é natural definir uma grandeza que, de certa forma, meça o quanto fiel é o estado transferido em relação ao estado inicial, ou seja, quanto do estado inicial $|\Psi_0\rangle$ está de fato em $|\Psi(t)\rangle$: a essa grandeza damos o nome fidelidade. A chamada transferência perfeita de estado já foi verificada para uma série de geometrias e contextos distintos (KENDON; TAMON, 2010; ALVIR et al., 2016; GODSIL, 2012). Na Fig. 2 apresentamos alguns grafos que apresentam transferência perfeita de estados. Em todos esses casos, considera-se um estado inicial local, isto é, $|\Psi_0\rangle = |j\rangle$, com j denotando o vértice inicial no qual está localizado o estado. Neste trabalho, em contraste com os resultados já conhecidos na literatura, desejamos testar a possibilidade de transferência de um estado deslocalizado. Reescrevendo o estado inicial como uma superposição de diferentes estados de posição, $|\Psi_0\rangle = \sum_j f(j) |j\rangle$, onde $f(j)$ representa a função distribuição que dá forma ao estado inicial, verificamos a possibilidade deste estado emergir com as mesmas características iniciais em outra região do grafo.

1.2 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

A dissertação está organizada em cinco capítulos. No Cap. 2 fazemos uma breve introdução à teoria dos grafos, em seguida apresentamos os conceitos básicos para o estudo das CQCTs, construindo o formalismo a partir das cadeias de Markov de tempo discreto e contínuo (casos clássicos), para então chegar ao caso quântico, estabelecendo as ferramentas necessárias para análise das caminhadas quânticas tanto no espaço de posições quanto de momentos. No Cap. 3 apresentamos resultados referentes a caminhadas na linha infinita, enfatizando a dispersão dos estados local e deslocalizado, bem como a impossibilidade de obter-se transferência de estado nesse caso. No Cap. 4 analisamos CQCTs em grafos C_n , para estados locais e deslocalizados. Verificamos as condições para a obtenção de transferência de estados e periodicidade para diferentes estados iniciais, e, por fim, apresentamos as conclusões do trabalho no Cap. 5. Demais cálculos auxiliares estão presentes no apêndice A.

Todas as figuras e gráficos presentes nesta dissertação que não possuem fonte indicada na legenda são de própria autoria. Matrizes são indicadas por letras em negrito, e usamos unidades naturais, de modo que $\hbar \equiv 1$.

2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Neste capítulo desenvolveremos o ferramental matemático necessário para o estudo das caminhadas quânticas em grafos, em particular, as caminhadas quânticas contínuas no tempo (CQCT). Utilizaremos duas abordagens, uma no espaço de posições e a outra, no de momentos. No espaço de posições, a evolução temporal de um estado quântico é gerada pelo hamiltoniano do sistema, o qual engloba os aspectos geométricos do grafo analisado e nos permite abordar tais caminhadas via decomposição espectral. Já no espaço de momentos, podemos obter expressões analíticas para algumas quantidades de interesse.

Iniciaremos introduzindo o conceito e a definição de grafo seguindo o caminho histórico: pelo problema das pontes de Königsberg, solucionado por Leonhard Euler em 1736. A partir do problema de Königsberg, introduzimos a notação utilizada neste trabalho e descrevemos algumas propriedades de grafos e matrizes associadas a estes. Em seguida, apresentaremos os processos de Markov discretos, conectando-os com a ideia da caminhada aleatória clássica em uma dimensão (PEARSON, 1905); posteriormente, os processos de Markov de tempo contínuo, para então fazermos a passagem para o caso quântico. Na descrição da caminhada quântica no espaço de posições, apresentaremos os conceitos de transferência de estados e fidelidade. Por último, reescreveremos o estado quântico no espaço de momentos deixando os detalhes matemáticos para o Apêndice.

2.1 BREVE INTRODUÇÃO HISTÓRICA À TEORIA DE GRAFOS

A teoria de grafos surge no contexto de um problema muito particular, na cidade de Königsberg (atual Kaliningrado, Rússia), no século XVIII. Segundo consta (PAOLETTI, 2006), havia um desafio, um jogo, entre os habitantes da cidade, que tinham como hábito passear pela região central desta, cortada pelo rio Prególia, aos fins de semana. O desafio consistia em encontrar um caminho que permitisse atravessar, uma única vez, cada uma das sete pontes da região (Figura 3). Mesmo os moradores não encontrando tal caminho, ainda não havia sido possível provar que este, de fato, não existia.

Em 1736, o problema foi apresentado a Leonhard Euler, que finalmente provou ser impossível encontrar uma solução para o problema. A prova feita por Euler passa por uma ideia central de reinterpretar o problema, mudando o foco das pontes para as faixas de terra: identificando estas como pontos (vértices), e representando as pontes como ligações entre estes pontos (arestas), Euler obteve a representação do problema na forma de um grafo (Figura 4). A partir desta ideia, podemos definir matematicamente alguns conceitos da chamada geometria das posições, conhecida hoje por teoria de grafos (MACIEL, 2018).

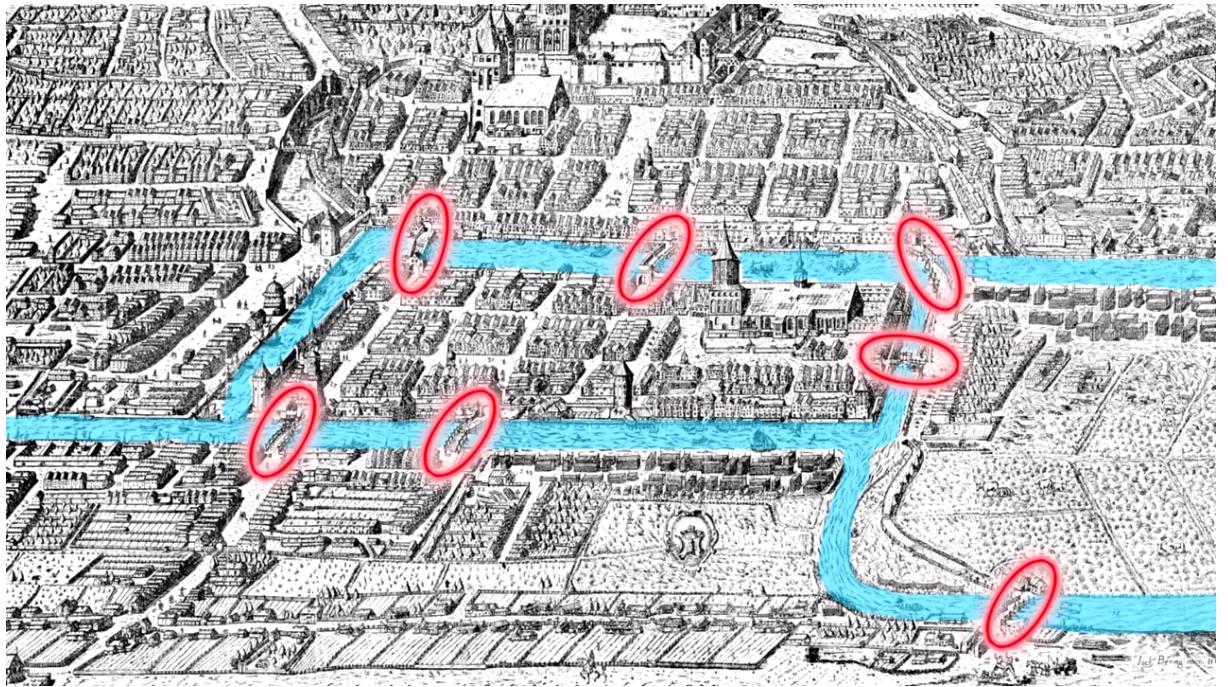


Figura 3 – As sete pontes de Königsberg (atual Kaliningrado), conectando as quatro faixas de terra, como em 1736. Figura extraída de (NUMBERPHILE, 2016).

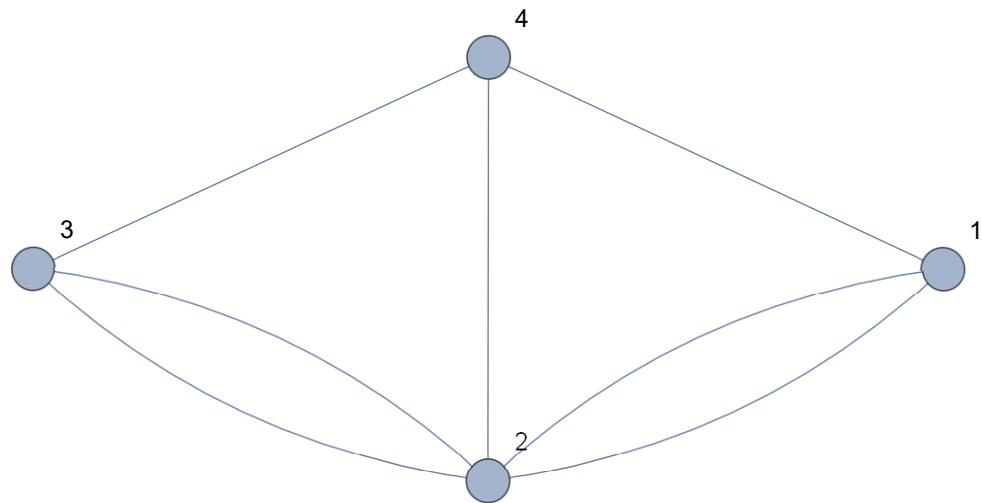


Figura 4 – Representação em grafo do problema de Königsberg.

Definição. Um grafo $\mathcal{G}(\mathcal{V}, \mathcal{E})$ consiste de um conjunto não vazio \mathcal{V} , de p vértices, e de um conjunto \mathcal{E} de q pares (arestas) não ordenados¹ de vértices em \mathcal{V} . O número de vértices de um grafo é chamado cardinalidade $|\mathcal{G}|$, enquanto o número de arestas conectadas a um vértice é chamado grau do vértice, d .

¹ Trata-se de um grafo não orientado ou não dirigido, no qual é irrelevante a ordem dos vértices nas arestas (são simétricos), ou seja, o vértice $\{a, b\}$ é equivalente ao vértice $\{b, a\}$.

O grafo da Figura 5 é formado por um conjunto de 4 vértices e 4 arestas, sendo

$$\mathcal{V} = \{1, 2, 3, 4\}, \\ \mathcal{E} = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}\}.$$

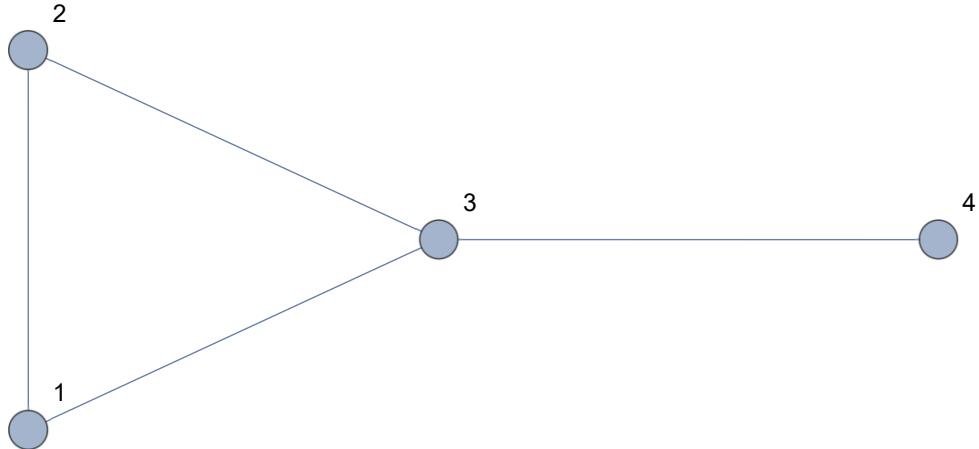


Figura 5 – Exemplo de grafo com $p = 4$ vértices e $q = 4$ arestas.

Retomando as pontes de Königsberg, Euler mostrou que vértices de grau par não trariam problemas (NUMBERPHILE, 2016; NEWMAN, 2010), uma vez que, chegando em tais vértices, havia sempre uma ponte disponível para chegar ao próximo. Ainda, começando o caminho por um vértice de grau par, este poderia ser o vértice de chegada. Todavia, vértices de grau ímpar representavam casos especiais, podendo compor o caminho apenas como ponto de partida e/ou de chegada. Por exemplo, no grafo 3-pan da Figura 5 podemos percorrer todas as arestas uma única vez partindo somente dos vértices de grau ímpar 3 ou 4. Consequentemente, um grafo que satisfizesse o problema possuiria, no máximo, dois vértices de grau ímpar, o que não ocorre no caso de Königsberg, onde todos os vértices possuem grau ímpar. Assim, Euler mostrou que o problema de Königsberg não possuía solução.

2.2 MATRIZ ADJACÊNCIA E LAPLACIANO DE UM GRAFO

Podemos representar grafos matricialmente, através da chamada matriz adjacência \mathbf{A} , que representa as conexões entre os vértices do grafo:

$$A_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{para cada conexão entre } i \text{ e } j \\ 0, & \text{de outra forma.} \end{cases} \quad (2.1)$$

Por exemplo, a matriz adjacência do grafo do problema de Königsberg na Figura 4 é

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Notemos que a soma dos elementos de dada coluna j equivale ao grau do vértice correspondente, d_j . Como a matriz \mathbf{A} é simétrica, o mesmo resultado vale para as linhas da matriz adjacência:

$$d_i = \sum_j A_{ij}. \quad (2.3)$$

Há também outra matriz - intimamente relacionada à matriz adjacência - que nos diz muito sobre a estrutura dos grafos e que será de suma importância posteriormente, chamada matriz laplaciana (NEWMAN, 2010). Introduziremos esta matriz analisando um processo de difusão num grafo, que pode ser utilizado como um modelo rudimentar de espalhamento em rede, por exemplo, a difusão de uma ideia ou até mesmo de uma doença. Considere uma quantidade física ψ_i , localizada no vértice i que se espalha pelos vértices vizinhos do grafo, como na Figura 6. Ainda, supomos que esta quantidade flui do vértice j para o vértice adjacente i numa taxa $C(\psi_j - \psi_i)$, onde C é a constante de difusão. Deste modo, a taxa com que ψ_i varia é dada por

$$\frac{d\psi_i}{dt} = C \sum_j A_{ij}(\psi_j - \psi_i) \quad (2.4)$$

Separando os dois termos da equação anterior, fazendo uso da Eq. 2.3 e do delta de Kronecker, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_i}{dt} &= C \sum_j A_{ij}\psi_j - C\psi_i \sum_j A_{ij} = C \sum_j A_{ij}\psi_j - C\psi_i d_i \\ &= C \sum_j (A_{ij} - \delta_{ij}d_i) \psi_j. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Agora, podemos reescrever esta equação na forma matricial,

$$\frac{d\psi}{dt} = C(\mathbf{A} - \mathbf{D})\psi, \quad (2.6)$$

onde ψ é o vetor cujas componentes são ψ_j , \mathbf{A} é a matriz adjacência e \mathbf{D} é a matriz diagonal contendo os graus dos vértices:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & d_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & d_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Definindo a matriz $\mathbf{L} = \mathbf{A} - \mathbf{D}$, reescrevemos a Eq. 2.6 como

$$\frac{d\psi}{dt} = C\mathbf{L}\psi, \quad (2.8)$$

que é idêntica à equação do calor, com a matriz \mathbf{L} fazendo o papel do operador laplaciano ∇^2 . Desta forma, a matriz \mathbf{L} recebe o nome de laplaciano do grafo, que será de fundamental importância no estudo das caminhadas quânticas contínuas no tempo.

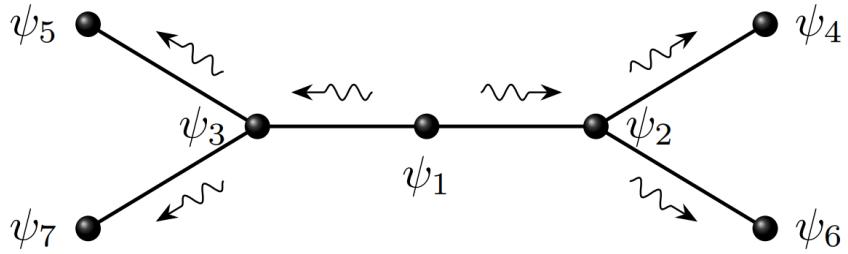


Figura 6 – Difusão de uma quantidade física ψ por um grafo. Figura extraída de (MACIEL, 2018).

2.3 PROCESSOS DE MARKOV E CAMINHADAS ALEATÓRIAS CLÁSSICAS

Classicamente, caminhadas em grafos podem ser entendidas como processos de Markov, ou seja, como sistemas sem memória cuja evolução depende apenas de seu estado atual. Agora, descreveremos cadeias de Markov de tempos discreto e contínuo, seguindo os passos de (PORTUGAL, 2013), que servirão como base para a construção das CQCT.

2.3.1 Cadeias de Markov de tempo discreto

Lidando com o tempo como variável discreta, imaginemos uma caminhada num grafo $\mathcal{G}(\mathcal{V}, \mathcal{E})$ no qual o conjunto dos vértices \mathcal{V} representa as posições e o conjunto de arestas \mathcal{E} , os caminhos possíveis a percorrer. Assim, a cada passo de tempo há uma distribuição de probabilidades associada ao grafo, ou seja, diferentes probabilidades de encontrarmos o caminhante em cada vértice. A distribuição de probabilidades pode ser descrita por um vetor na forma

$$\vec{p}(t) = \begin{pmatrix} p_1(t) \\ \vdots \\ p_n(t) \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

onde $p_1(t)$ é a probabilidade de encontrarmos o caminhante no vértice 1 no tempo t , da mesma maneira para os outros vértices. A evolução da caminhada se dá de forma recursiva: sabendo as probabilidades num determinado tempo t , obtemos as probabilidades no próximo passo de tempo utilizando a matriz de transição \mathbf{M} , também chamada matriz estocástica,

$$\vec{p}(t+1) = \mathbf{M}\vec{p}(t). \quad (2.10)$$

Para garantir que $\vec{p}(t+1)$ seja uma distribuição de probabilidades, isto é, $p_i \geq 0, \forall i$ e $\sum_i p_i = 1$, a matriz \mathbf{M} deve possuir apenas elementos reais não negativos, e a soma dos elementos de suas linhas deve ser igual a 1. Os elementos M_{ij} da matriz de transição representam a probabilidade do caminhante em i ir para j , assim, não havendo conexão entre esses vértices, $M_{ij} = 0$. As matrizes estocástica e adjacência estão relacionadas, e podemos escrever seus elementos como

$$M_{ij} = \frac{A_{ij}}{d_j}, \quad (2.11)$$

onde d_j representa o grau do vértice j . Numa cadeia de Markov não é possível dizer de maneira determinística, onde estará a partícula no futuro, porém, podemos determinar a distribuição de probabilidades para um tempo qualquer sabendo a matriz de transição. Partindo de uma distribuição inicial $\vec{p}(0)$, após sucessivas t aplicações de \mathbf{M} obtemos

$$\vec{p}(t) = \mathbf{M}^t \vec{p}(0). \quad (2.12)$$

Exemplo 1. Caminhada aleatória clássica

O conhecido problema do “passeio do bêbado”, referente à caminhada aleatória unidimensional (PEARSON, 1905), pode ser tratado com o formalismo de uma cadeia de Markov discreta (PORTUGAL, 2013). A cada passo de tempo o caminhante possui a mesma probabilidade de dar um passo à esquerda ou à direita, e a reta infinita onde se dá a caminhada pode ser encarada como um grafo, onde os vértices representam as possíveis posições do caminhante, como mostrado na Figura 7. Para determinar a matriz de transferência deste grafo usamos a Eq. 2.11. As únicas entradas não nulas da matriz adjacência são os elementos vizinhos da diagonal, e como cada vértice possui grau 2, temos

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots \end{pmatrix}.$$

Tomando a posição inicial do caminhante como o vértice central da Figura 7, os vetores de probabilidades $\vec{p}(t)$, após t multiplicações sucessivas pela matriz \mathbf{M} são

$$\begin{aligned} \vec{p}^T(0) &= (\dots \ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ \dots), \\ \vec{p}^T(1) &= (\dots \ 0 \ 0 \ \frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{2} \ 0 \ 0 \ \dots), \\ \vec{p}^T(2) &= (\dots \ 0 \ \frac{1}{4} \ 0 \ \frac{1}{2} \ 0 \ \frac{1}{4} \ 0 \ \dots), \\ \vec{p}^T(3) &= (\dots \ \frac{1}{8} \ 0 \ \frac{3}{8} \ 0 \ \frac{3}{8} \ 0 \ \frac{1}{8} \ \dots), \end{aligned}$$

onde o sobrescrito T indica transposição. Com efeito, podemos recuperar a conhecida distribuição de probabilidades para a caminhada aleatória clássica em uma dimensão por meio deste método recursivo, onde os vetores $\vec{p}^T(t)$ são idênticos às linhas da tabela 1.

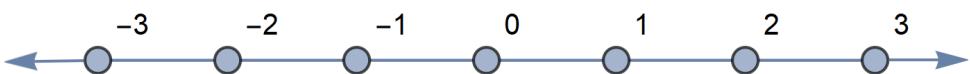


Figura 7 – Linha infinita como um grafo.

$t \setminus j$	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	1/2	0	1/2	0	0	0	0
2	0	0	0	1/4	0	1/2	0	1/4	0	0	0
3	0	0	1/8	0	3/8	0	3/8	0	1/8	0	0
4	0	1/16	0	1/4	0	3/8	0	1/4	0	1/16	0
5	1/32	0	5/32	0	5/16	0	5/16	0	5/32	0	1/32

Tabela 1 – Distribuição de probabilidades para uma caminhada aleatória clássica em uma dimensão, com os valores de t denotando os passos da caminhada e j as posições.

2.3.2 Cadeias de Markov de tempo contínuo

A análise das cadeias de Markov de tempo contínuo se mostra pertinente uma vez que este modelo serviu como inspiração para o formalismo das CQCT. Da mesma forma que procedemos anteriormente, consideremos o grafo $\mathcal{G}(\mathcal{V}, \mathcal{E})$. Quando tratamos o tempo como variável contínua, a partícula pode migrar de um vértice i para outro j em qualquer tempo. Podemos visualizar esta ideia de forma análoga a um fluido que escoa de um ponto a outro: inicialmente é mais provável encontrar o caminhante em i , com o passar do tempo, aumenta a probabilidade de encontrarmos o caminhante nos vértices vizinhos, e diminui a probabilidade de encontrá-lo em i , de tal forma que há uma taxa de transição entre os vértices, que denotamos por γ . Assim, γ indica a probabilidade por unidade de tempo da partícula migrar do vértice i para j . A princípio, esta taxa poderia ser diferente para cada aresta do grafo, mas aqui tomaremos γ constante para todo o conjunto de arestas, o que representa um grafo homogêneo e isotrópico. Desta forma, num pequeno intervalo de tempo ε , a probabilidade de transição será $\gamma\varepsilon$. O vértice i possui d_i vizinhos, logo, a probabilidade da partícula migrar para algum dos vértices vizinhos neste intervalo de tempo é $\gamma\varepsilon d_i$, e a probabilidade de permanecer em i é $1 - \gamma\varepsilon d_i$. No caso contínuo, os elementos M_{ij} da matriz de transição são definidos como a probabilidade da partícula que está em i migrar para j no intervalo de tempo t ,

$$M_{ij}(\varepsilon) = \begin{cases} 1 - \gamma\varepsilon d_i + \mathcal{O}(\varepsilon^2) & \text{para } i = j \\ \gamma\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2) & \text{para } i \neq j. \end{cases} \quad (2.13)$$

Podemos encontrar uma expressão para $\vec{p}(t)$, com o auxílio da matriz geradora \mathbf{H} , definida como:

$$H_{ij} = \begin{cases} \gamma d_i & \text{para } i = j \\ -\gamma & \text{para } i \neq j \text{ e adjacente} \\ 0 & \text{para } i \neq j \text{ e não adjacente.} \end{cases} \quad (2.14)$$

Determinar as probabilidades de transição num tempo $t + \varepsilon$ consiste em determinar os elementos da matriz $\mathbf{M}(t + \varepsilon)$. Analogamente a uma sequência de eventos independentes tal como os lançamentos de um dado, por exemplo, multiplicamos a probabilidade de cada evento

acontecer, aqui $\mathbf{M}(t + \varepsilon) = \mathbf{M}(t)\mathbf{M}(\varepsilon)$. Portanto,

$$M_{ij}(t + \varepsilon) = \sum_k M_{ik}(t)M_{kj}(\varepsilon). \quad (2.15)$$

Notando que

$$M_{kj} = \begin{cases} -\varepsilon H_{kj} & \text{para } k \neq j \\ 1 - \varepsilon H_{jj} & \text{para } k = j, \end{cases}$$

podemos separar o termo $k = j$ na Eq. 2.15:

$$M_{ij}(t + \varepsilon) = M_{ij}(t)(1 - \varepsilon H_{jj}) - \varepsilon \sum_{k \neq j} M_{ik}(t)H_{kj}.$$

Trazendo o primeiro termo do lado direito da equação acima para o esquerdo, e dividindo toda a expressão por ε temos, no limite $\varepsilon \rightarrow 0$,

$$\frac{dM_{ij}(t)}{dt} = - \sum_k H_{kj} M_{ik}(t) \quad (2.16)$$

cuja solução com condição inicial $M_{ij} = \delta_{ij}$ é

$$\mathbf{M}(t) = e^{-\mathbf{H}t}, \quad (2.17)$$

que pode ser facilmente verificada tomando a expansão em série de Taylor da função exponencial. Portanto, de posse da matriz de transição, podemos obter a distribuição de probabilidades para um tempo qualquer, de forma similar a como procedemos para o caso discreto, obtendo

$$\vec{p}(t) = \mathbf{M}(t)\vec{p}(0) = e^{-\mathbf{H}t}\vec{p}(0). \quad (2.18)$$

2.4 CQCT NO ESPAÇO DE POSIÇÕES

Determinar a evolução no tempo de um sistema quântico não relativístico resume-se, basicamente, a resolver a equação de Schrödinger,

$$i \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle. \quad (2.19)$$

Nosso intuito é analisar a estrutura e dinâmica das caminhadas quânticas contínuas no tempo em um grafo $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, logo o espaço de Hilbert \mathcal{H} da caminhada é discreto e seus elementos pertencem a $\{|a\rangle\}$, tal que $a \in \mathbb{Z}$ correspondem aos vértices do grafo. Assim, inserindo a relação de completeza para os estados dos vértices na equação de Schrödinger (JOHNSON, 2015), obtemos

$$i \frac{d}{dt} \langle a | \Psi(t) \rangle = \sum_b \langle a | \hat{H} | b \rangle \langle b | \Psi(t) \rangle, \quad (2.20)$$

de modo que a probabilidade de encontrar a partícula no vértice a é

$$\mathcal{P}(a, t) = |\langle a | \Psi(t) \rangle|^2, \quad (2.21)$$

e as probabilidades são conservadas como:

$$\sum_a |\langle a | \Psi(t) \rangle|^2 = 1. \quad (2.22)$$

O estado $|\Psi(t)\rangle$, que satisfaz a equação de Schrödinger, no caso de um hamiltoniano independente do tempo, pode ser obtido utilizando o operador de evolução temporal $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}$, de modo que

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U} |\Psi_0\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Psi_0\rangle. \quad (2.23)$$

Portanto, se faz necessário um operador hamiltoniano \hat{H} que incorpore as características da rede que desejamos estudar. Neste caso, o hamiltoniano de uma CQCT deve representar as características estruturais do grafo - restringindo o movimento da partícula a vértices conectados - o que pode ser feito matricialmente, partindo da ideia de um processo de Markov contínuo. Em (FARHI; GUTMANN, 1998) Farhi e Gutmann propuseram que o operador \hat{H} , hamiltoniano do sistema, em analogia a um processo de Markov, é dado pela matriz geradora \mathbf{H} (equação 2.14). Em nosso estudo, utilizaremos $\gamma \equiv 1$, de tal sorte que a matriz \mathbf{H} torna-se igual ao laplaciano \mathbf{L} do grafo, resultando em

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\mathbf{L}t} |\Psi_0\rangle. \quad (2.24)$$

Quando o estado inicial $|\Psi_0\rangle \in \mathcal{H}$ é local, representando uma partícula localizada em um vértice específico i , podemos escrever $|\Psi_0\rangle = |i\rangle$. Já para um estado deslocalizado, isto é, a partícula pode estar em um vértice inicial segundo uma distribuição inicial, temos

$$|\Psi_0\rangle = \sum_j f(j) |j\rangle, \quad (2.25)$$

representando uma superposição de estados de posição (vértices), ponderados por uma função $f(j)$ que caracteriza a distribuição inicial, tal que

$$\sum_j |f(j)|^2 = 1. \quad (2.26)$$

Por exemplo, para um estado retangular (uniforme truncado) distribuído ao longo de n vértices temos,

$$f_R(j) = \frac{1}{\sqrt{n}}, \quad (2.27)$$

ou ainda, para um estado Gaussiano discreto simétrico (GHIZONI; AMORIM, 2019) centrado no vértice c ,

$$f_G(j) = \frac{1}{(2\pi\sigma_0)^{\frac{1}{4}}} \exp\left[-\frac{(j-c)^2}{4\sigma_0^2}\right]. \quad (2.28)$$

onde σ_0 representa a dispersão inicial da partícula e estamos considerando um grafo suficientemente grande ($n \gg 1$), a fim de garantir a normalização dada pela Eq. 2.26.

Sejam $\{\lambda_a\}$ e $\{|\Phi_a\rangle\}$ os conjuntos dos autovalores e autoestados normalizados de \mathbf{L} , respectivamente, de modo que

$$\mathbb{1} = \sum_{a=1}^m |\Phi_a\rangle\langle\Phi_a|, \quad (2.29)$$

tal que m é o número de autovalores e autovetores de \mathbf{L} . Logo, diagonalizando \mathbf{L} e inserindo a relação de completeza dada pela Eq. 2.29 na Eq. 2.24, obtemos:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-i\mathbf{L}t} \sum_{a=1}^m |\Phi_a\rangle \langle \Phi_a|\Psi(0)\rangle \\ &= \sum_{a=1}^m e^{-i\lambda_a t} \langle \Phi_a|\Psi(0)\rangle |\Phi_a\rangle. \end{aligned} \quad (2.30)$$

A Eq. 2.30 ilustra o que chamamos de decomposição espectral, onde escrevemos o estado evoluído no tempo, $|\Psi(t)\rangle$, na base dos autoestados do operador Laplaciano.

2.5 TRANSFERÊNCIA DE ESTADO E FIDELIDADE

Em geral, quando um dado estado local $|\Psi(0)\rangle = |i\rangle$ evolui no tempo, este se espalha pelos vértices de acordo com a geometria do grafo. Contudo, sob certas circunstâncias, é possível que este estado se reorganize, reemergindo em um vértice distinto, caracterizando o que chamamos de transferência de estado. Dizemos que um grafo \mathcal{G} possui transferência perfeita de estado (KENDON; TAMON, 2010) do vértice a para b , no tempo t^* , se

$$\left| \langle b | e^{-i\mathbf{L}t^*} | a \rangle \right| = 1. \quad (2.31)$$

A transferência de um estado local pode ser avaliada por meio da fidelidade de um estado quântico, como

$$\mathcal{F}_j(t) = \left| \langle j | e^{-i\mathbf{L}t} | \Psi(0) \rangle \right|^2, \quad (2.32)$$

que representa o quanto próximo do estado inicial é o estado que se encontra num certo vértice alvo j , ou ainda, quanto do estado inicial se encontra nesse vértice. Assim, se há transferência perfeita do estado inicial para um vértice j , obtemos máxima fidelidade $\mathcal{F}_j(t) = 1$. É interessante notar que para um estado local, $P_j(t) = \mathcal{F}_j(t)$, ou seja, a probabilidade de encontrar a partícula no vértice j dado pela Eq. 2.21 é idêntica a fidelidade $\mathcal{F}_j(t)$ da Eq. 2.32.

Exemplo 2. Grafo K₂

Para ilustrar o mecanismo desenvolvido até aqui veremos um exemplo simples, do grafo K_2 , que consiste em apenas dois vértices conectados, como mostrado na Figura 9. Assim, tomando os vetores de base como os próprios vértices do grafo, podemos escrevê-los como

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

e a matriz laplaciana

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix},$$

com autovalores $\lambda_1 = 2$ e $\lambda_2 = 0$ e autovetores normalizados

$$|\Phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |1\rangle), \quad |\Phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle).$$

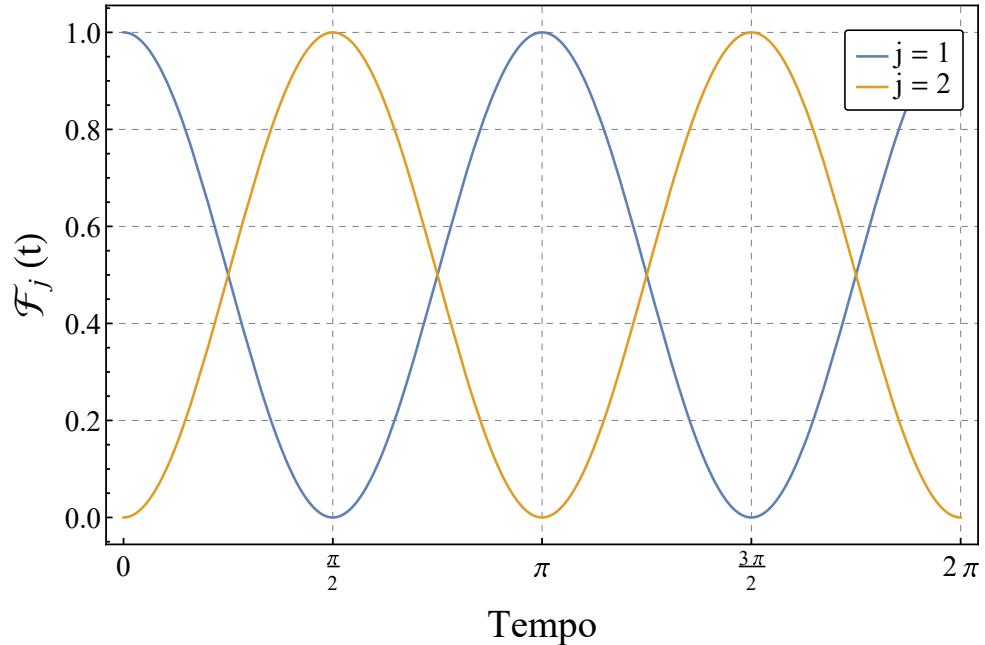
Partindo de um estado inicial $|\Psi(0)\rangle = |1\rangle$ e aplicando a Eq. 2.30, obtemos:

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{2}(1 + e^{-2it})|1\rangle + \frac{1}{2}(1 - e^{-2it})|2\rangle.$$

Utilizando a definição de fidelidade podemos encontrar os valores de tempo para os quais o estado encontra-se localizado no vértice 2, ou seja, determinar os valores t^* correspondentes à transferência perfeita de estado do vértice 1 ao 2. Deste modo,

$$\mathcal{F}_2(t) = \left| \langle 2 | e^{-i\mathbf{L}t} | 1 \rangle \right|^2 = |\langle 2 | \Psi(t) \rangle|^2 = \sin^2 t,$$

impondo $\mathcal{F}_2(t^*) = 1$ obtemos $t^* = (l + \frac{1}{2})\pi$ com $l \in \mathbb{N}$. Procedendo analogamente para o vértice 1, obtemos $t^* = l\pi$ que representa a periodicidade do estado, ou seja, o tempo necessário para o estado retornar ao vértice inicial. Na Figura 8, temos a fidelidade ou a probabilidade de encontrar a partícula em cada vértice em função do tempo.

Figura 9 – Grafo K_2 .Figura 8 – Probabilidades de encontrar a partícula nos vértices 1 e 2 do grafo K_2 , para $|\Psi(0)\rangle = |1\rangle$.

2.6 CQCT NO ESPAÇO DE MOMENTOS

Outra forma de analisar as caminhadas quânticas é reescrevendo seus estados por meio do espaço dos momentos. Da relação $p = \hbar k$, onde k é o número de onda e utilizando unidades naturais, tal que $\hbar = 1$ tem-se que $p = k$, de modo que neste trabalho denotaremos o momento pela letra k . Assim, o espaço de momentos é contínuo, em contraste com o espaço de posições composto pelos vértices do grafo, com $k \in [-\pi, \pi]$. A passagem do espaço de posições para o espaço de momento é feita via transformadas de Fourier (ARFKEN, 2007), cujos detalhes estão desenvolvidos no Apêndice A.1:

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=0}^{n-1} e^{-ikj} f(j), \quad (2.33)$$

$$f(j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{ikj} \tilde{f}(k), \quad (2.34)$$

onde n denota o número de vértices do grafo. Uma transformação de Fourier também pode ser obtida para os estados de posição $|j\rangle$ e de momento $|k\rangle$:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=0}^{n-1} e^{ikj} |j\rangle, \quad (2.35)$$

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{-ikj} |k\rangle. \quad (2.36)$$

Trabalhando no espaço de momentos podemos obter expressões analíticas para quantidades de interesse, como por exemplo, a distribuição de probabilidades em função do tempo para um dado estado inicial. Este recurso será utilizado no capítulo seguinte.

3 CQCT NA LINHA INFINITA

Com o intuito de investigar e caracterizar aspectos da dinâmica das caminhadas quânticas contínuas no tempo (CQCT), analisaremos agora os casos de caminhadas ao longo de uma linha infinita, partindo de estados localizados e deslocalizados. Para tal, trabalharemos no espaço de momentos, e aqui ficará clara a praticidade deste espaço na obtenção de resultados analíticos. Começamos a análise a partir da geometria dos espaços desta caminhada: a linha infinita em questão pode ser encarada como um grafo infinito, cujos vértices representam as posições ao longo da linha, como na Figura 7. Portanto, o operador hamiltoniano (laplaciano do grafo) tem a forma

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \ddots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Da ação deste hamiltoniano num ket de posição, resulta

$$\mathbf{L}|j\rangle = 2|j\rangle - |j+1\rangle - |j-1\rangle, \quad (3.2)$$

comportamento que ilustra a dinâmica da caminhada: a informação na posição j é distribuída com igual probabilidade para os vértices vizinhos, conectados por uma aresta cada um, e, a partir destes vértices vizinhos, o vértice em j também recebe informação. A diferença de sinal decorre do sentido em que viaja a informação, saindo (entrando) no vértice. Atuando com o operador laplaciano em $|k\rangle$ e usando a Eq. 2.35, temos

$$\mathbf{L}|k\rangle = \sum_j \frac{e^{ikj}}{\sqrt{2\pi}} \mathbf{L}|j\rangle = \sum_j \frac{e^{ikj}}{\sqrt{2\pi}} (2|j\rangle - |j+1\rangle - |j-1\rangle). \quad (3.3)$$

A partir do operador de translação, $\hat{T} = e^{-ikj}$, cuja ação é $\hat{T}|a\rangle = |j+a\rangle$,

$$\mathbf{L}|k\rangle = \sum_j \frac{e^{ikj}}{\sqrt{2\pi}} \left(2 - e^{ik} - e^{-ik} \right) |j\rangle = 2(1 - \cos k)|k\rangle, \quad (3.4)$$

vemos que os autoestados de momento do operador hamiltoniano possuem autovalores $2(1 - \cos k)$, resultado que será útil na evolução das caminhadas.

3.1 ESTADOS LOCAIS

Com o resultado da Eq. 3.4 podemos calcular a distribuição de probabilidades em função do tempo para diferentes estados iniciais. Partindo de um estado inicial localizado no vértice zero, $|\Psi_0\rangle = |0\rangle$:

$$\mathcal{P}_j(t) = \left| \langle j | e^{-i\mathbf{L}t} | 0 \rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \langle j | \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{-i\mathbf{L}t} | k \rangle \right|^2, \quad (3.5)$$

onde utilizamos a Eq. (2.36) para escrever o estado inicial no espaço dos momentos. Assim, substituindo os autovalores de \mathbf{L} e sabendo que $\langle j|k \rangle = (2\pi)^{-1/2}e^{ikj}$, obtemos

$$\mathcal{P}_j(t) = \left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{-2it(1-\cos k)} e^{ikj} \right|^2 = |J_j(2t)|^2, \quad (3.6)$$

onde J_j é a função de Bessel de ordem j . Esta expressão indica a probabilidade em função do tempo em um dado vértice j , logo, pode ser utilizada para determinar a distribuição de probabilidades ao longo dos vértices da linha infinita. Aqui, vale ressaltar que a expressão dentro do módulo na Eq. 3.6 não é identicamente igual à função de Bessel citada. A igualdade reside, de fato, entre $|\langle j|\Psi(t)\rangle|^2$ e o módulo quadrado das funções $J_j(2t)$. Na Figura 10 a seguir, mostramos a distribuição de probabilidades para diferentes valores de tempo partindo de um estado inicial localizado no vértice zero. É importante destacar o perfil das distribuições de probabilidades com o passar do tempo: partindo de um estado local, o estado evolui para vários picos que se propagam em sentidos opostos a partir da origem, com maior probabilidade nos extremos. Notamos que, neste caso, o argumento das funções de Bessel é o tempo, enquanto que a posição j indica a ordem das funções. Atentando ao perfil das funções de Bessel, sabemos que sua amplitude diminui com o aumento de seu argumento, ou seja, tempos maiores tendem a apresentar menores amplitudes de probabilidades.

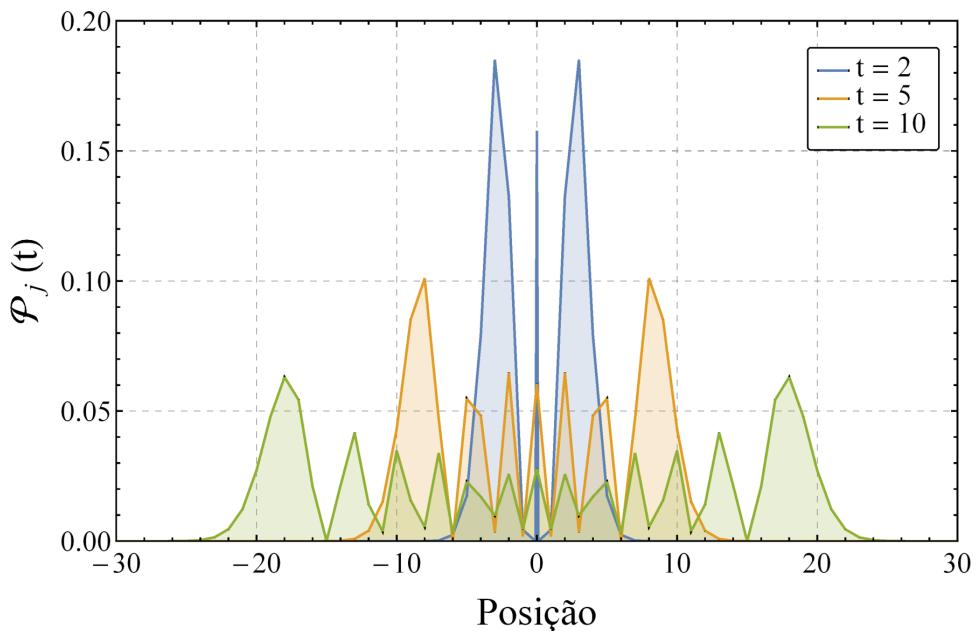


Figura 10 – Distribuições de probabilidade para a CQCT na linha infinita, partindo de um estado local, nos tempos $t = 2, 5$ e 10 .

Ainda, para um dado valor de t , as maiores amplitudes acontecem nas posições mais afastadas da origem. Isso deve-se ao fato de que, quanto maior a ordem de uma função de Bessel (maior posição j), mais distante da origem (em um maior valor de t) encontra-se seu primeiro pico, de máxima amplitude. Tomemos como exemplo as posições 13 e 18: as amplitudes de probabilidades são, respectivamente, $|J_{13}(2t)|^2$ e $|J_{18}(2t)|^2$. No tempo $t = 10$, a função $|J_{13}|^2$

encontra-se próxima de seu segundo máximo, enquanto a função $|J_{18}|^2$ está praticamente em seu primeiro máximo, resultando no comportamento visto na Figura 10.

3.2 ESTADOS DESLOCALIZADOS

Um caso de interesse é a caminhada na reta a partir de um estado deslocalizado, ou seja, quando $|\Psi_0\rangle$ é dado por uma distribuição inicial. Para ilustrar esse comportamento utilizaremos um estado Gaussiano centrado no vértice zero, distribuído entre os vértices no intervalo $[-N, N]$.

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &= \sum_{n=-N}^N f_G(n) |n\rangle \\ &= \sum_{n=-N}^N \frac{\exp(-n^2/4\sigma_0^2)}{(2\pi\sigma_0)^{\frac{1}{4}}} |n\rangle, \end{aligned} \quad (3.7)$$

Procedendo analogamente ao caso local,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_j(t) &= \left| \langle j | e^{-i\mathbf{L}t} \sum_n f(n) |n\rangle \right|^2 \\ &= \left| \sum_n \frac{f(n)}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{ik(j-n)} e^{-2it(1-\cos k)} \right|^2. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Esta relação pode ser escrita de forma compacta em termos de uma soma de funções de Bessel,

$$\mathcal{P}_j(t) = \left| \sum_n f(n) i^{j-n} J_{j-n}(2t) \right|^2. \quad (3.9)$$

Aqui, vários passos intermediários foram omitidos, e uma análise mais detalhada pode ser encontrada no Apêndice B. Ainda, notamos que este resultado vale para qualquer distribuição $f(n)$. Em termos de um estado Gaussiano, com distribuição $f_G(n)$, temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_j(t) &= \left| \sum_n f_G(n) i^{j-n} J_{j-n}(2t) \right|^2 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} \left| \sum_{n=-N}^N i^{-n} e^{-n^2/4\sigma_0^2} J_{j-n}(2t) \right|^2. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Para visualizar o que ocorre na evolução de um estado Gaussiano, utilizamos a Eq. 3.10 com $N = 50$ e $\sigma_0 = 4$ e determinamos as distribuições de probabilidades nos tempos $t = 20$ e 40 apresentando-as junto com o estado inicial na Figura 11. Notamos que o resultado obtido contrasta bastante com a evolução de um estado local, já que o estado Gaussiano se espalha suavemente, mantendo as maiores probabilidades no centro da distribuição.

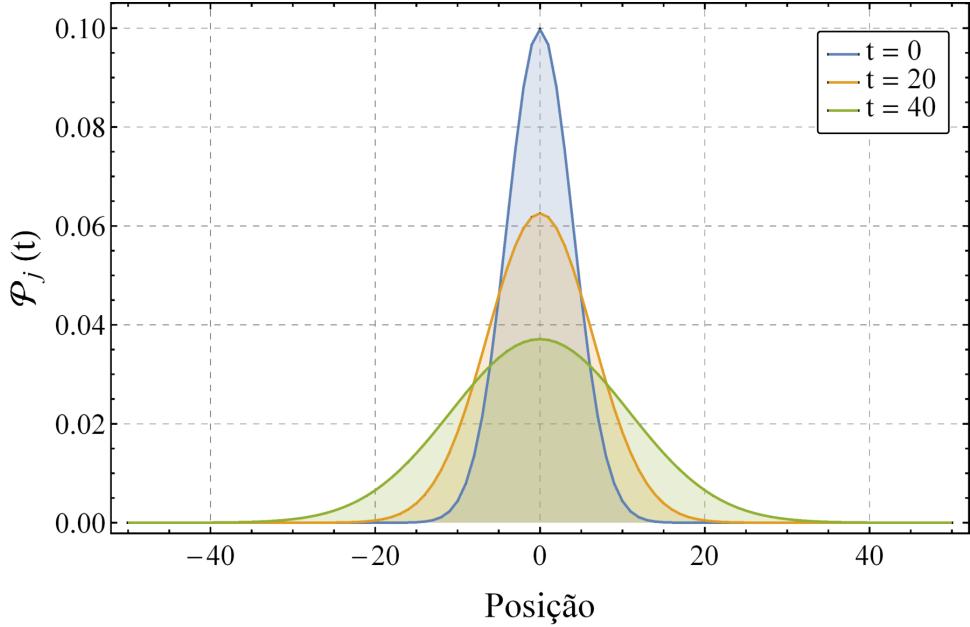


Figura 11 – Distribuições de probabilidade para a CQCT na linha infinita, partindo de um estado Gaussiano, nos tempos $t = 0, 20$ e 40 .

3.3 DISPERSÃO DOS ESTADOS

Uma das características mais marcantes da caminhada quântica é o transporte balístico da partícula quântica. Isso implica que a dispersão na posição é quadraticamente superior ao comportamento difusivo $\sigma \propto \sqrt{t}$ de uma partícula clássica. Embora os perfis de distribuição de probabilidade dos estados local e Gaussiano aparentam serem distintos, ambos apresentam comportamento balístico, isto é, as variâncias de ambos os estados dada por

$$\sigma(t)^2 = \sum_j j^2 \mathcal{P}_j(t) - \left(\sum_j j \mathcal{P}_j(t) \right)^2, \quad (3.11)$$

são proporcionais a t^2 e portanto, a dispersão pode ser escrita como $\sigma = \alpha t$. No entanto, a constante de proporcionalidade α varia significativamente em função da dispersão inicial σ_0 do estado. Para o estado local temos dispersão máxima cuja constante $\alpha = \sqrt{2}$, enquanto para os estados Gaussianos com $\sigma_0 \geq 1$, temos α consideravelmente menor como pode ser visto na Figura 12. Ademais, é perceptível a semelhança do comportamento entre um estado deslocalizado e o conhecido padrão de dispersão de um pacote de onda Gaussiano, no qual temos que, se o estado é largo, seu espalhamento ou dispersão ao longo do tempo será pequeno (GASIOROWICZ, 2003). Esse é exatamente o caso aqui, apesar de estarmos lidando com um espaço discreto de posições, enquanto um pacote de onda se espalha num espaço contínuo de posições.

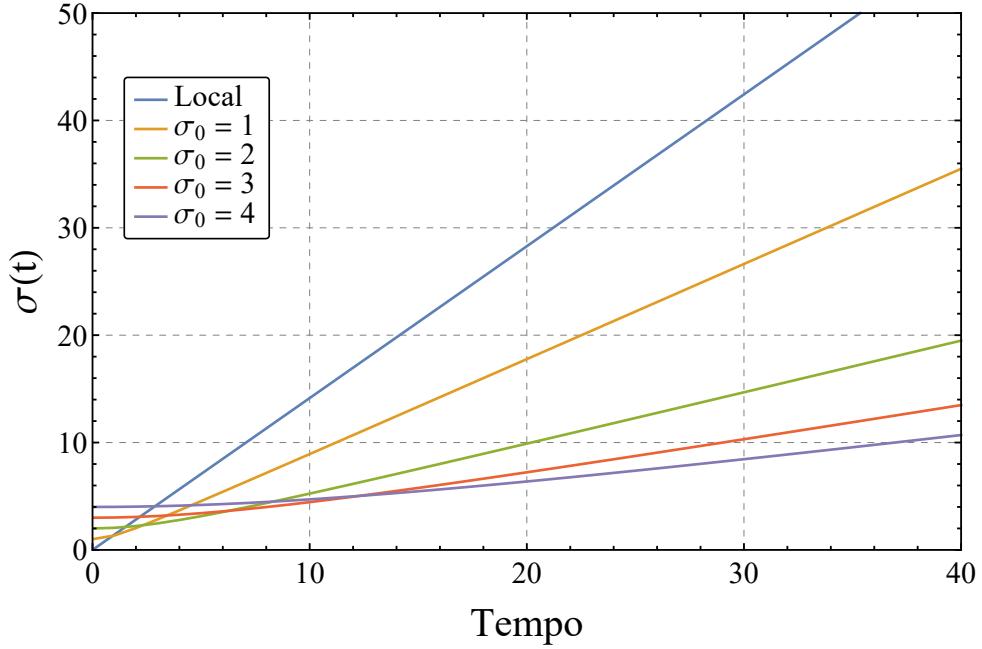


Figura 12 – Dispersão no tempo para os estados local e Gaussianos com dispersão inicial $\sigma_0 = 1, 2, 3$ e 4 .

Por fim, ressaltamos um detalhe simples, porém fundamental para este trabalho: ao analisar as caminhadas quânticas numa linha infinita, não podemos, ainda, falar sobre transferência de estado. Como o estado inicial se espalha em sentidos opostos - tanto para estados locais quanto para estados deslocalizados - é impossível recuperar a informação contida em um estado inicial em qualquer outro ponto de uma linha infinita. Portanto, para obtermos transferência de estado, fica evidente a necessidade de uma geometria finita (representada por um grafo), que permita a superposição necessária para reconstruir o estado inicial em outra região do grafo. Tal feito pode ser obtido em diferentes tipos de grafos partindo de um estado local, como detalhado nas referências (BARR et al., 2013), (KENDON; TAMON, 2010) e (ANGELES-CANUL et al., 2010). No próximo capítulo voltaremos nossa atenção ao grafo circular, cuja geometria fechada possibilita a transferência de estados com alta fidelidade, em particular, partindo de um estado inicial deslocalizado.

4 CQCT EM GEOMETRIAS CIRCULARES

Tendo em vista o formalismo desenvolvido no capítulo anterior, estamos em posição de utilizá-lo, agora, na análise de problemas envolvendo caminhadas quânticas contínuas no tempo (CQCT) em geometrias particulares, especificadas pelas estruturas dos grafos. Em particular, nosso interesse reside no problema da transferência de estado em geometrias fechadas, isto é, em grafos cíclicos, da família C_n . Nossa análise será feita via decomposição espectral e faremos uma comparação com alguns resultados analíticos.

4.1 O GRAFO C_n

Podemos visualizar um grafo cíclico na forma de um anel, como uma linha finita cujos vértices inicial e final são conectados entre si. Assim, todos os vértices do grafo possuem exatamente dois vizinhos, e a matriz adjacência de um grafo C_n possui a forma

$$\mathbf{A}_{C_n} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Notemos que a matriz \mathbf{A}_{C_n} possui a estrutura de uma matriz circulante, isto é, cada linha da matriz pode ser obtida a partir de uma permutação cíclica da linha anterior. Como todos os vértices possuem dois vizinhos, para o caso de um grafo C_n , a matriz laplaciana é dada por:

$$\mathbf{L} = \mathbf{A}_{C_n} - \mathbf{D} = \mathbf{A}_{C_n} - 2 \times \mathbb{1}_n, \quad (4.2)$$

onde $\mathbb{1}_n$ é a matriz identidade de ordem n . Deste modo, como \mathbf{A} e \mathbf{D} comutam, o operador de evolução temporal (omitindo os subíndices das matrizes) será

$$e^{-i\mathbf{L}t} = \mathbb{1} e^{2it} e^{-i\mathbf{A}t}, \quad (4.3)$$

o que introduz um fator de fase irrelevante na evolução do estado. Com efeito, podemos nos ater apenas à matriz adjacência no decorrer de nossas análises. É comum denotarmos os índices das matrizes circulantes por $j = 0, 1, \dots, n - 1$. Toda matriz circulante pode ser diagonalizada pela matriz \mathbf{F} de Fourier (AHMADI et al., 2002),

$$\mathbf{F} = \frac{1}{\sqrt{n}} \mathbf{V}(\omega), \quad (4.4)$$

onde \mathbf{V} é a matriz de Vandermonde,

$$\mathbf{V}(\omega) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 & \cdots & \omega^{n-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \cdots & \omega^{2(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{n-1} & \omega^{2(n-1)} & \cdots & \omega^{(n-1)^2} \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

com $\omega = e^{2\pi i/n}$. Assim, a matriz $\mathbf{F}\mathbf{A}\mathbf{F}^\dagger$ é diagonal. Podemos denotar a j -ésima coluna da matriz de Fourier como o vetor $|F_j\rangle$, que se relaciona com os vetores de base dos vértices do grafo como

$$|F_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} |\omega_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{a=0}^{n-1} \omega^{ja} |a\rangle. \quad (4.6)$$

Estes vetores formam uma base normalizada, e podemos escrever a relação de completeza

$$\mathbb{1} = \sum_{j=0}^{n-1} |F_j\rangle\langle F_j| = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} |\omega_j\rangle\langle\omega_j|. \quad (4.7)$$

Pode-se mostrar que os autovalores da matriz adjacência \mathbf{A}_{C_n} são dados por

$$\lambda_j = \omega^j + \omega^{j(n-1)} = 2\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right), \quad (4.8)$$

resultado que será de valiosa utilidade no estudo das caminhadas quânticas nos grafos C_n .

4.2 ESTADOS LOCAIS

Tomando um estado inicial localizado no vértice zero, podemos analisar a evolução de tal estado utilizando o resultado da seção anterior, tomando a decomposição espectral da matriz adjacência do grafo C_n :

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi_0\rangle = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} e^{-i\lambda_j t} |\omega_j\rangle\langle\omega_j| |0\rangle = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} e^{-2it\cos(2\pi j/n)} |\omega_j\rangle, \quad (4.9)$$

onde inserimos a relação de completeza da Eq. 4.7. Assim, a função de onda é dada por:

$$\Psi(a, t) = \langle a|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} e^{-2it\cos(2\pi j/n)} \omega^{ja}. \quad (4.10)$$

Nosso interesse central é estudar a transferência de informação para a região diametralmente oposta de uma rede circular de vértices, ou seja, buscamos transferir um estado inicial, denotado por Alice, para o vértice antipodal, denotado por Bob. Num grafo C_n , enumerando os vértices de zero a $n - 1$, definimos o vértice antipodal m como

$$m = \frac{n - \text{mod}(n, 2)}{2}, \quad (4.11)$$

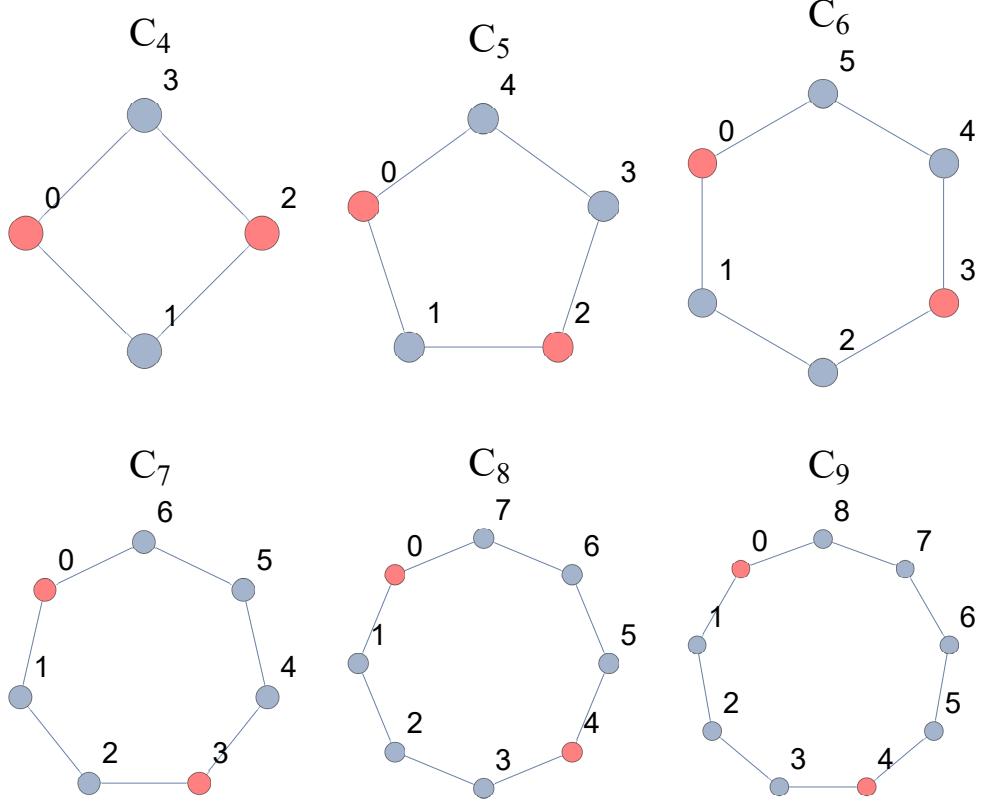


Figura 13 – Grafos C_4 a C_9 , destacando os vértices inicial (Alice) e antipodal (Bob) em vermelho, de acordo com a definição dada pela Eq. 4.11.

onde $\text{mod}(n, 2)$ indica a operação módulo 2. Fica claro, com esta definição e pela Figura 13, que para grafos C_n com n ímpar não é possível tomar um vértice exatamente antipodal, afinal, para isso é necessário um número total de vértices par. Todavia, isso não prejudica nossa análise, uma vez que tal vértice antipodal “deslocado” terá a mesma probabilidade, seja este deslocado para a direita ou para a esquerda. Se fixarmos $a = m$ na Eq. 4.10, podemos explicitar a probabilidade no vértice antipodal em função do tempo:

$$\mathcal{P}(m, t) = \frac{1}{n^2} \left| \sum_{j=0}^{n-1} e^{-2it \cos(2\pi j/n)} \omega^{mj} \right|^2. \quad (4.12)$$

Notemos que, como trata-se de um estado inicial local, partindo do vértice zero, a probabilidade no vértice m torna-se igual à fidelidade do estado (Eq. 2.32) numa transferência entre os vértices zero e m . Assim, as probabilidades $\mathcal{P}_n(m, t)$ no vértice antipodal para alguns pequenos grafos C_n pares são:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_4(2, t) &= \sin^4(t), \\ \mathcal{P}_6(3, t) &= \frac{16}{9} \sin^4\left(\frac{t}{2}\right) \sin^2(t), \\ \mathcal{P}_8(4, t) &= \frac{1}{16} \left(\cos(2t) - 2 \cos\left(\sqrt{2}t\right) + 1 \right)^2. \end{aligned}$$

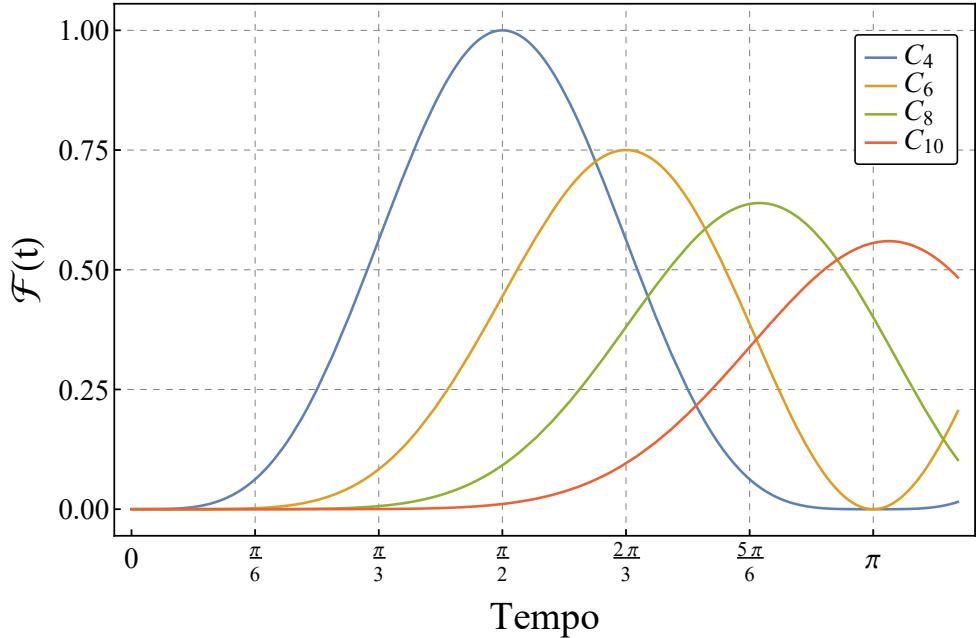


Figura 14 – Fidelidade do estado no vértice antipodal para grafos C_n com n par de 4 a 10. Os picos das funções apresentadas na figura representam o primeiro máximo local da fidelidade.

Para os casos ímpares as expressões tornam-se mais complexas mais rapidamente:

$$\mathcal{P}_5(2, t) = \frac{1}{25} \left\{ \left(\sqrt{5} - 1 \right) \cos \left(\frac{\sqrt{5} + 5}{2} t \right) - \left(\sqrt{5} + 1 \right) \cos \left(\frac{\sqrt{5} - 5}{2} t \right) - 2 \cos(\sqrt{5}t) + 4 \right\}.$$

Com efeito, passaremos agora a uma análise da transferência de estado. Como as probabilidades no vértice alvo envolvem combinações de várias funções trigonométricas, é esperado que apresentem diversos máximos e mínimos locais. Para sistematizar nosso estudo, adotaremos como referência para transferência de estado, o primeiro máximo local em $\mathcal{P}_n(m, t)$. Logo, determinaremos os valores de t para os quais a probabilidade é máxima com a condição

$$\frac{d}{dt} \mathcal{P}_n(m, t) = 0, \quad (4.13)$$

e na Figura 14 mostramos a fidelidade do estado em função do tempo em grafos C_n pequenos com n par, destacando esse primeiro máximo local. Notemos que, para $n = 4$ a fidelidade é máxima para $t^* = (2l + 1)\pi$ com $l \in \mathbb{Z}$, indicando que o estado inicial no vértice zero é totalmente transferido para o vértice antipodal periodicamente, no entanto, isso não ocorre a partir de $n = 6$. Portanto, vemos que existe uma tendência de diminuição da fidelidade do estado à medida em que aumentamos o tamanho da rede. Estudando separadamente os casos cujo número de vértices total é par ou ímpar, obtivemos as curvas do primeiro máximo da probabilidade \mathcal{P}_n em função do tamanho do grafo na Figura 15 até um tamanho máximo da rede com $n = 200$ vértices. Logo, vemos que a transferência de estado dado pela fidelidade cai com o tamanho da rede segundo a

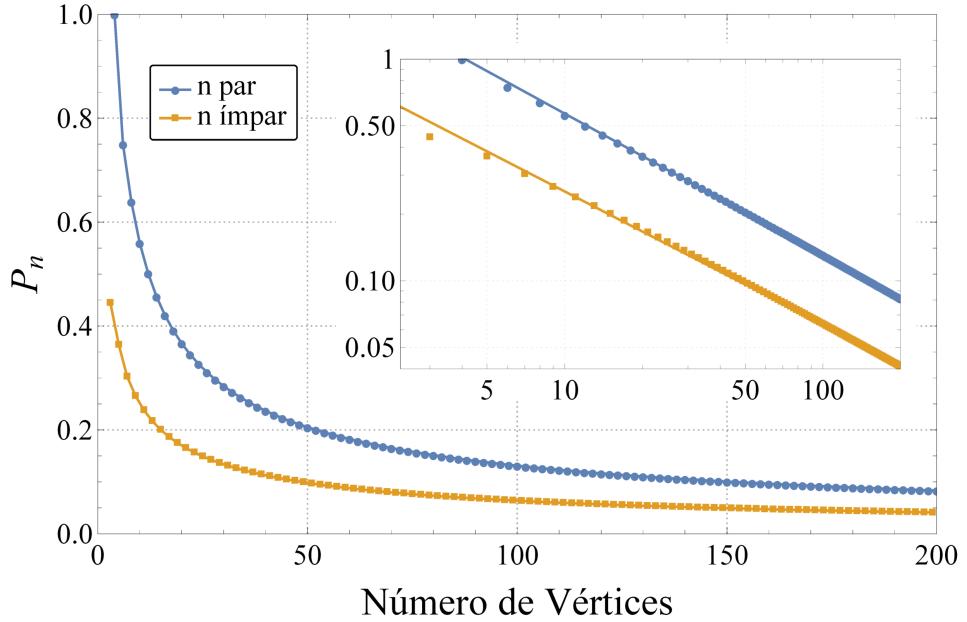


Figura 15 – Primeiro máximo de probabilidade no vértice antipodal em função do número total de vértices par e ímpar. No detalhe: em escala logarítmica com os respectivos ajustes.

lei de potência: $\mathcal{F} \sim n^{-\alpha}$. A partir dos gráficos em escala logarítmica obtivemos os expoentes $\alpha = 0,64$ para redes pares e $\alpha = 0,60$ para redes ímpares, evidenciando um comportamento similar tanto para vértices antipodais com n par, quanto para n ímpar - uma vez que, à medida em que cresce o tamanho da rede, a assimetria entre os grafos pares e ímpares passa a ser cada vez menor. Por fim, verifica-se que partindo de estados locais em grafos circulares, quanto maior a rede, menor a transferência de estado. Assim, caso nosso intuito seja transmitir informação de um vértice inicial (Alice) a um vértice alvo (Bob), sem alterar as estruturas da rede - isto é, mantendo as probabilidades de transição iguais entre todos os vértices - estados locais podem ser úteis no caso de redes substancialmente pequenas, como C_4 , porém, mostram-se ineficazes em contextos de redes maiores. A partir da próxima seção buscaremos uma alternativa a estados locais, visando melhorar a transferência de estado entre Alice e Bob.

4.3 ESTADOS DESLOCALIZADOS

Na seção anterior verificamos que, para estados iniciais locais, à medida que aumentamos o tamanho da rede, diminuem as probabilidades de transferência de estado para o vértice antipodal. Assim, como alternativa ao problema citado, buscaremos a transferência de informação utilizando estados deslocalizados. Vimos no capítulo 2 que um estado deslocalizado é escrito como na Eq. 2.25, tal que

$$|\Psi_0\rangle = \sum_a f(a) |a\rangle. \quad (4.14)$$

onde tomamos o índice a para denotar a região inicial (Alice) na qual o estado está distribuído e $f(a)$ representa a função de distribuição do estado inicial, caracterizando a superposição

de estados de vértices que compõem o estado inicial. Nesta seção, analisamos a evolução de uma CQCT para diferentes funções de distribuição, destacando quais fatores são determinantes na obtenção de alta fidelidade de estado na região antipodal¹. Buscamos agora sintetizar os resultados obtidos até aqui em uma forma analítica fechada, de modo a facilitar a análise quantitativa das CQCT em geometrias fechadas. Para obter o desejado resultado analítico, procedemos analogamente ao método utilizado na seção 4.2, a partir da diagonalização da matriz adjacência do grafo C_n . Tomando um estado inicial deslocalizado, distribuído pelo grafo inteiro, o estado $|\Psi(t)\rangle$ pode ser calculado via decomposição espectral da matriz adjacência, onde usamos a relação de completeza dos kets $|\omega_j\rangle$ dada por 4.7:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-i\mathbf{L}t} \sum_{a=0}^{n-1} f(a) |a\rangle \\ &= \frac{1}{n} e^{-i\mathbf{L}t} \sum_{a=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} f(a) |\omega_j\rangle \langle \omega_j| a\rangle \\ &= \frac{1}{n} \sum_{a=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} f(a) e^{-i\lambda_j t} \omega^{-ja} |\omega_j\rangle. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Assim, substituindo os autovalores $\lambda_j = 2\cos(2\pi j/n)$ (Eq. 4.8) obtemos a seguinte amplitude de probabilidade de cada vértice ao longo do tempo,

$$\Psi(b,t) = \langle b|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{n} \sum_{a=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} f(a) \omega^{j(b-a)} \exp\left[-2it\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)\right], \quad (4.16)$$

que incorpora a geometria do grafo C_n onde a caminhada evolui, tal que $\omega = \exp(2\pi i/n)$, e permite calcular a distribuição de probabilidades na rede em um tempo qualquer, tomado o módulo quadrado de $\Psi(x,t)$. Aqui, o índice b foi escolhido para diferenciar a representação dos vértices em a no estado inicial (Alice) com o estado evoluído no tempo (Bob). Ilustraremos este fato com o exemplo da distribuição Gaussiana, comparando estados com duas dispersões iniciais diferentes $\sigma_0 = 2$ e 5 . Tomando a equação 4.16, para um estado inicial Gaussiano, dado por

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma_0^2)^{\frac{1}{4}}} \sum_{a=0}^{n-1} \exp\left[-\left(\frac{a-\mu}{2\sigma_0}\right)^2\right] |a\rangle, \quad (4.17)$$

onde centramos o estado inicial no vértice μ , correspondendo ao centro da geometria, a forma completa da densidade de probabilidades é dada por:

$$\mathcal{P}(b,t) = \frac{1}{n^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} \left| \sum_{a=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} e^{-\left(\frac{a-\mu}{2\sigma_0}\right)^2} e^{\frac{2\pi i}{n} j(b-a)} e^{-2it\cos\left(\frac{2\pi j}{n}\right)} \right|^2. \quad (4.18)$$

A partir da equação 4.18 obtemos a figura 16, em concordância com os resultados via decomposição espectral nas seções anteriores, ilustrando a transferência de estado entre Alice e Bob.

¹ Como agora lidamos com estados deslocalizados, isto é, distribuídos em vários vértices, não faz mais sentido falar em vértices inicial e antipodal, portanto denotamos a região compreendida pelo estado inicial como *região inicial* (Alice) e os vértices diametralmente opostos como *região antipodal* (Bob).

Como já verificamos, dispersões muito estreitas não levam a uma transferência de estado com alta fidelidade - como ocorre para $\sigma_0 = 2$, diferentemente de $\sigma_0 = 5$ - o que também pode ser constatado na figura a seguir: quando a dispersão inicial não é suficientemente grande, o estado não se recompõe integralmente, e vemos uma “sobra” de probabilidades, semelhante a uma cauda em ambos os lados da distribuição de probabilidades no tempo de transferência t^* .

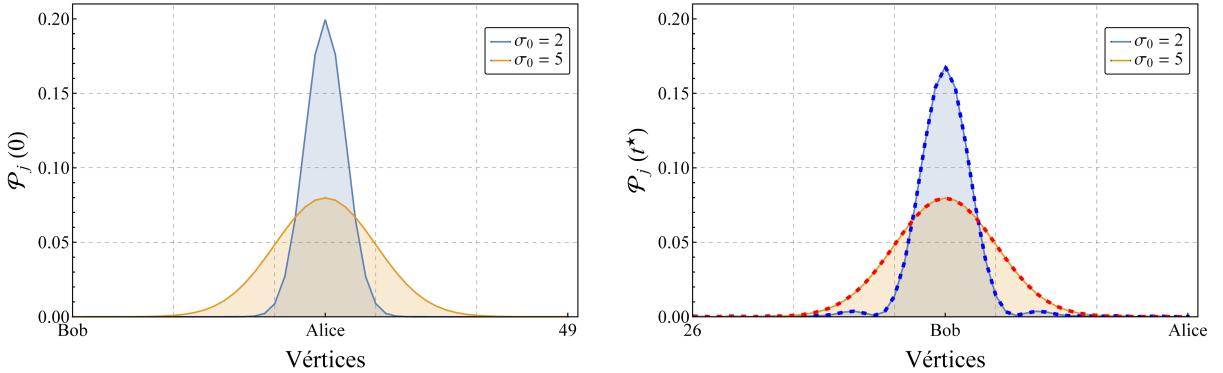


Figura 16 – Densidades de probabilidades para distribuições Gaussianas com dispersões $\sigma_0 = 2$ e 5 , respectivamente, nos tempos $t = 0$ (à esquerda) e t^* (à direita) no grafo C_{50} , obtidas a partir do resultado analítico da Eq. 4.18. Quando $\sigma_0 = 2$, $t^* = 204$; já para $\sigma_0 = 5$, $t^* = 200$. À direita notamos a transferência de estado com alta fidelidade para a região antipodal do grafo (denotada por Bob) para $\sigma_0 = 5$ e uma transferência com menor fidelidade quando $\sigma_0 = 2$. As linhas tracejadas, na figura à direita, representam os resultados obtidos via decomposição espectral (Eq. 2.30), em total acordo com a Eq. 4.18.

4.3.1 Fidelidade para estados deslocalizados

Como descrito no capítulo 2, a fidelidade de um estado local pode ser escrita como na Eq. 2.32,

$$\mathcal{F}_j(t) = \left| \langle j | e^{-i\mathbf{L}t} | \Psi(0) \rangle \right|^2,$$

mas agora, ao se tratar de estados deslocalizados, é necessário uma nova forma de calcular a fidelidade, que leve em consideração o caráter distribuído do estado inicial, assim como o deslocamento do estado ao longo dos vértices. Para tanto, vamos introduzir um operador de deslocamento,

$$\mathcal{D}_x = \sum_j |j+x\rangle \langle j|, \quad (4.19)$$

cujo objetivo é transladar o estado em x vértices. Analogamente à Eq. 2.32 para o estado local, queremos uma fidelidade que descreva o quão semelhante um dado estado inicial deslocalizado é comparado a esse estado evoluído no tempo independente de sua localização no grafo, ou seja, podemos escrever,

$$\mathcal{F} = |\langle \Psi(t) | \mathcal{D}_x | \Psi(0) \rangle|^2. \quad (4.20)$$

Considerando que o estado $|\Psi(t)\rangle$ será um estado distribuído ao longo dos vértices do grafo, podemos escrevê-lo como uma superposição de estados,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_b g(b) |b\rangle \quad (4.21)$$

distribuído de acordo com a função $g(b)$. Notemos que o índice b denota uma região alvo distinta da região a . Considerando a atuação do operador de deslocamento (Eq. 4.19) no estado inicial da Eq. 4.14 escolhendo x convenientemente como $x = b - a$, obtemos

$$\mathcal{D}_x |\Psi(0)\rangle = \sum_b f(b-x) |b\rangle, \quad (4.22)$$

onde temos todas as amplitudes do estado inicial transladadas para o centro do pacote de onda dado por $|\Psi(t)\rangle$ (VIEIRA; RIGOLIN; AMORIM, 2021). Substituindo o estado dado pela Eq. 4.21 e o resultado da Eq. 4.22 na Eq. 4.20 da fidelidade, temos finalmente que

$$\mathcal{F} = \left| \left(\sum_b g^*(b) \langle b | \right) \left(\sum_b f(b-x) |b\rangle \right) \right|^2 = \left| \sum_b g^*(b) f(b-x) \right|^2, \quad (4.23)$$

e assim como no caso local, nos fornece $\mathcal{F} = 1$ para fidelidade máxima e vemos que, para $a \neq b$, avalia a qualidade da transferência do estado de uma região do grafo para outra.

4.3.2 Estado Retangular

Chamamos estado retangular aquele que é dado por uma distribuição uniforme truncada, isto é, um estado uniforme dentro de um certo intervalo $[-N, N]$, sendo nulo fora desse intervalo. Assim,

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{j=-N}^N |j\rangle. \quad (4.24)$$

Nosso interesse reside em encontrar as relações entre a dispersão do estado inicial e o tamanho da rede que possibilitem transferência de estados entre regiões diametralmente opostas do grafo. Para uma distribuição uniforme discreta de tamanho $2N+1$ podemos determinar a largura do estado inicial como função da dispersão inicial σ_0 na forma²,

$$2N+1 = \sqrt{12\sigma_0^2 + 1}. \quad (4.25)$$

Como precisamos que o número N seja um inteiro, na Tabela 2 mostramos os inteiros mais próximos calculados pela Eq. 4.25 para diferentes dispersões σ_0 .

σ_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N	1	3	5	6	8	10	12	13	15	17

Tabela 2 – Valores aproximados de N para diferentes dispersões σ_0 numa distribuição retangular.

² Em geral, tomando os limites da distribuição entre os vértices 1 e N , a variância da distribuição é dada pelo resultado conhecido $\sigma_0^2 = (N^2 - 1)/12$. Aqui, o tamanho total da distribuição é $2N+1$, de modo que basta tomar $N \rightarrow 2N+1$ na expressão anterior para obter o resultado mostrado na Eq. 4.25.

Primeiramente, fixando dispersões iniciais σ_0 iguais a 2, 5 e 10, analisamos a fidelidade do estado para diferentes tamanhos de rede. Na Figura 17 temos a fidelidade do estado em função do tempo, para os valores de σ_0 citados acima, com $t \in [0, 10^3]$. O valor inicial máximo da fidelidade (em $t = 0$) corresponde ao estado inicial. O primeiro pico dos gráficos corresponde ao momento em que o estado inicial se recompõe parcialmente na região antipodal do grafo, representando uma transferência de estado parcial, o que pode ser visualizado na Figura 18 - onde plotamos as densidades de probabilidade de dois estados iniciais, e destes mesmos estados no primeiro valor de t^* (tempo de transferência) para o grafo C_{40} . O segundo máximo representa o retorno do estado à região inicial, e assim sucessivamente: o estado inicial se espalha pelo grafo, recompõe-se na região antipodal, volta a se distribuir pelo grafo e se reconstitui na região inicial. Atentando apenas para o primeiro máximo da fidelidade - primeira transferência parcial para a região antipodal - observamos que, se o estado inicial for suficientemente largo, com $\sigma_0 \geq 5$, a fidelidade assume valores maiores que 80%.

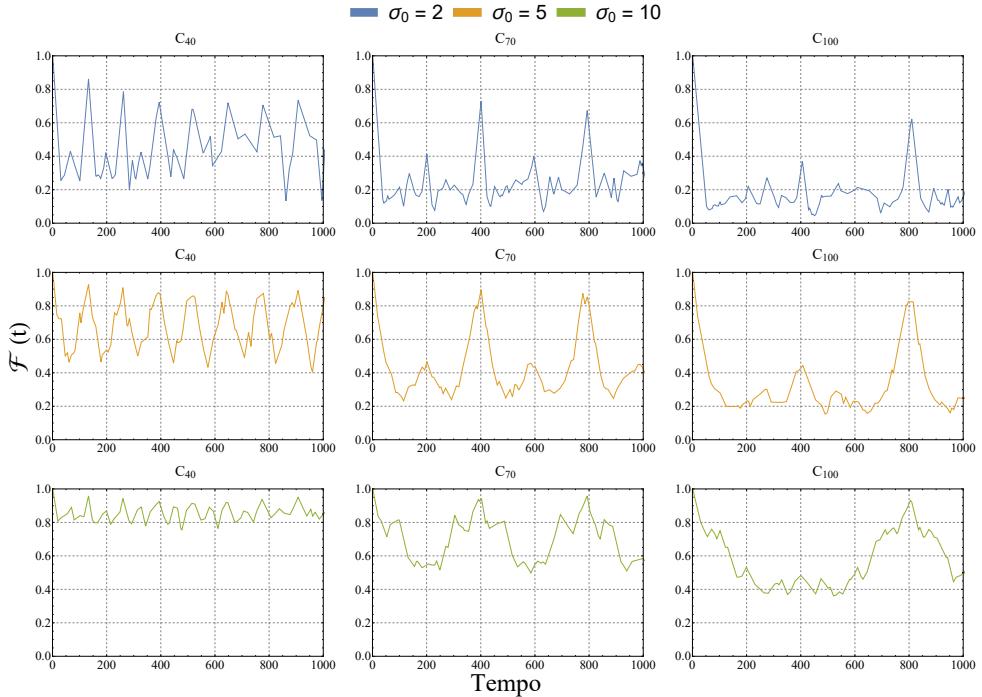


Figura 17 – Fidelidade do estado retangular em função do tempo para dispersões $\sigma_0 = 2, 5$ e 10 , nos grafos C_{40} , C_{70} e C_{100} . Na construção desta figura utilizamos um filtro para reduzir os ruídos das curvas e facilitar a visualização dos picos de fidelidade.

Apesar de ainda não obtermos uma transferência de estado ótima, ao distribuir o estado inicial obtivemos fidelidades consideravelmente maiores na região antipodal, contrastando com estados locais. Notamos também que, mesmo para dispersões iniciais diferentes, os tempos de transferência t^* nos quais ocorrem os picos nos gráficos da Figura 17 são muito parecidos, e crescem com o quadrado do tamanho da rede: $t^* \sim n^2$, onde n é o número total de vértices do grafo C_n . Em seguida, analisamos a transferência de estado na Figura 19, por meio da primeira fidelidade na região antipodal em função do tamanho da rede. Aqui, chamamos a atenção para a

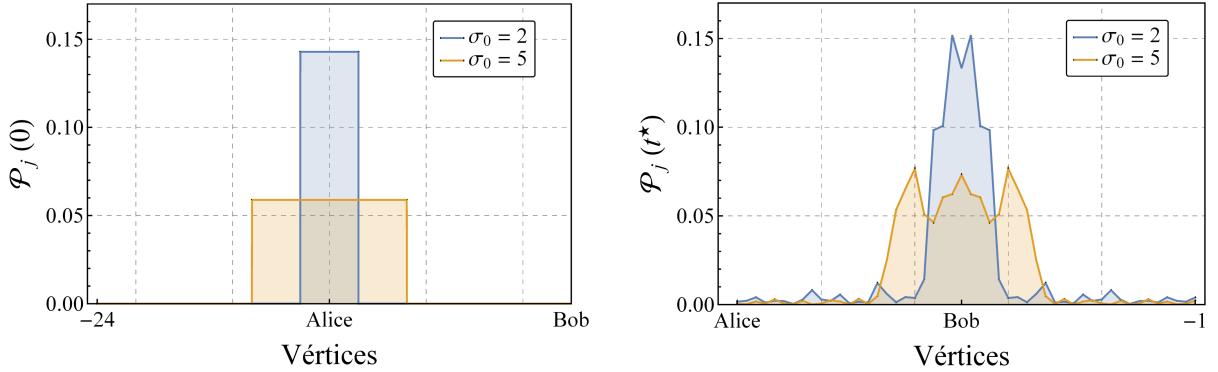


Figura 18 – Densidades de probabilidades para estados retangulares com dispersões $\sigma_0 = 2$ e 5 , respectivamente, nos tempos $t = 0$ (à esquerda) e t^* (à direita) no grafo C_{50} . Para $\sigma_0 = 2$, $t^* = 205$; já para $\sigma_0 = 5$, $t^* = 203$. À direita, temos a reconstituição parcial do estado na região antipodal do grafo.

diferença de comportamento entre estados locais e deslocalizados: à medida que o estado inicial é distribuído em mais vértices ($\sigma_0 = 5$ e 10) obtemos uma transferência de estado com maior fidelidade mesmo em redes grandes. Já estados pouco distribuídos apresentam fidelidades cada vez menores em redes grandes - comportamento semelhante ao visto em estados locais.

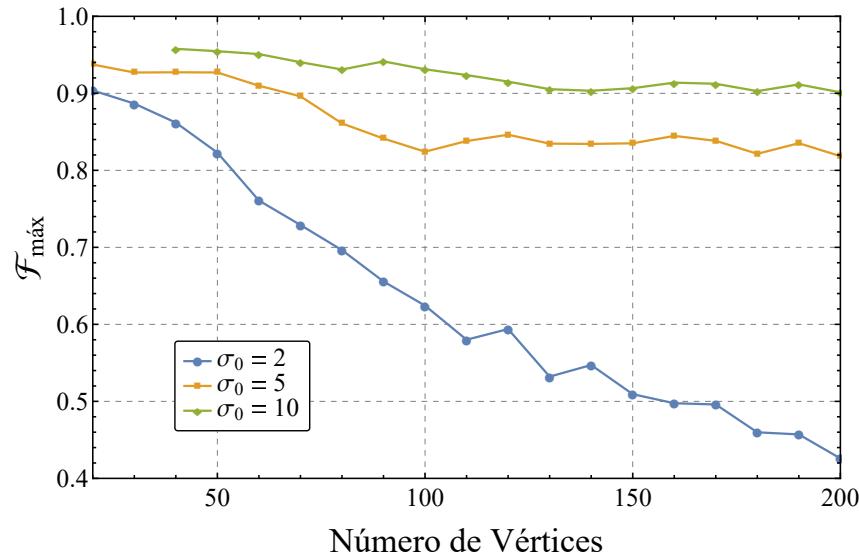


Figura 19 – Fidelidade máxima para diferentes tamanhos da rede C_n , partindo de estados retangulares com dispersões $\sigma_0 = 2$, 5 e 10 . Notemos que a curva com $\sigma_0 = 10$ começa a partir de grafos com 40 vértices, pois são necessários 35 vértices para distribuir um estado com esta dispersão (ver Tabela 2).

Ao observarmos a evolução dinâmica de estados retangulares ao longo de um grafo, identificamos que ainda existe uma tendência em se dispersar como uma distribuição de probabilidade de múltiplos picos, semelhante ao caso local, dificultando uma superposição que descreva exatamente a descontinuidade do estado retangular como pode ser visto na Figura 18. Isso claramente, compromete uma transferência fiel do estado de uma região para outra.

Nas próximas seções, vamos explorar estados cujas funções de distribuições possuem derivadas finitas que variam suavemente ao longo dos vértices, a fim de entender o impacto da geometria do estado na sua transferência ao longo da rede.

4.3.3 Estado Gaussiano

Visando caracterizar com maior riqueza de detalhes a evolução da caminhada para estados deslocalizados, estudamos estados iniciais que obedecem distribuições suaves. Repetiremos agora a análise da seção anterior para um estado Gaussiano discreto centrado no vértice zero (Alice) do grafo,

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{n=-N}^N \frac{\exp(-n^2/4\sigma_0^2)}{(2\pi\sigma_0^2)^{1/4}} |n\rangle, \quad (4.26)$$

cuja condição de normalização é dada por

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} \sum_{n=-N}^N \exp\left(-\frac{n^2}{2\sigma_0^2}\right) = A. \quad (4.27)$$

É importante notar que, a depender da dispersão do estado, o valor de N na equação anterior deve ser grande o suficiente para comportar o estado respeitando a normalização do mesmo ($A = 1$). No entanto, caso haja divergência numérica, podemos impor a normalização multiplicando o estado inicial por \sqrt{A} obtido a partir da Eq. 4.27. Particularmente, isso torna-se crítico para dispersões iniciais $\sigma_0 \leq 1$ (VIEIRA; RIGOLIN; AMORIM, 2021; ORTHEY; AMORIM, 2017). No entanto, no nosso contexto aqui em geometrias fechadas, consideramos $N = 5\sigma_0$ e dispersões iniciais $\sigma_0 > 1$, portanto assumimos $A = 1$.

Na Figura 20 novamente comparamos a fidelidade do estado como função do tempo para diferentes dispersões e tamanhos de rede. Alguns aspectos já observados no caso retangular são reforçados aqui: primeiramente, o comportamento periódico da propagação do estado se repete, e observamos transferências para a região antipodal (primeiro pico de fidelidade) seguida de reconstituições do estado na região inicial (segundo pico de fidelidade), e assim sucessivamente para os outros máximos dos gráficos. Verificamos também que o tempo de transferência t^* continua sendo praticamente o mesmo, para diferentes valores de σ_0 , sendo novamente proporcional a n^2 , ou seja, $t^* = an^2$, onde a constante de proporcionalidade $a \approx 0,08$. Esse valor de a , arredondado na primeira casa decimal, foi o mesmo para todas as distribuições analisadas, sejam Gaussianas ou retangulares, quaisquer que sejam as dispersões, e, portanto, concluímos que o fator preponderante que afeta o tempo de transferência t^* para estados deslocalizados em redes circulares é somente o número total de vértices do grafo. Ainda, com estados Gaussianos a eficiência da transferência de estado é otimizada: a partir de $\sigma_0 = 5$ a perda de fidelidade com o aumento do tamanho da rede é muito pequena. Para explorar este último fato, na Figura 21 mostramos exclusivamente os valores da fidelidade no primeiro pico dos gráficos da Figura 20, assim como feito na seção anterior. Comparando com o caso retangular, é nítida a melhora na transferência de estado ao utilizar uma distribuição Gaussiana, que mesmo para dispersões não

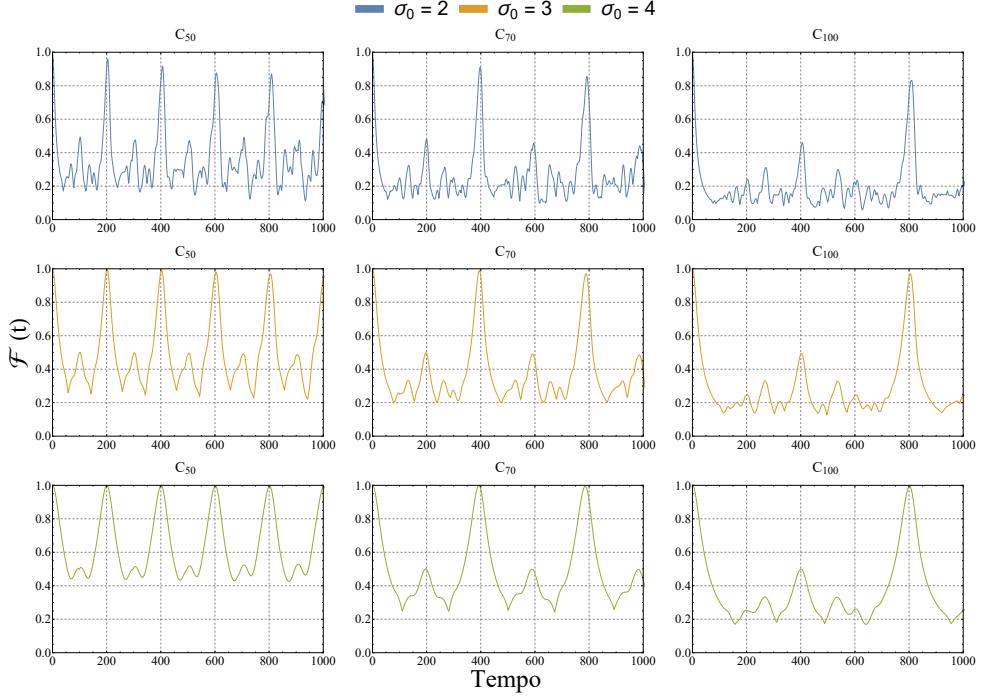


Figura 20 – Fidelidade do estado Gaussiano em função do tempo para dispersões $\sigma_0 = 2, 3$ e 4 , nos grafos C_{50} , C_{70} e C_{100} .

muito grandes, como $\sigma_0 = 4$, por exemplo, apresenta uma transferência com fidelidade próxima de 100% em grafos C_{100} . Ademais, um dos resultados mais importantes dessa seção, é para o caso de uma distribuição Gaussiana com $\sigma_0 = 10$, cuja perda de fidelidade é ínfima e vemos na Figura 21 que a fidelidade correspondente a essa dispersão é praticamente constante, ou seja,

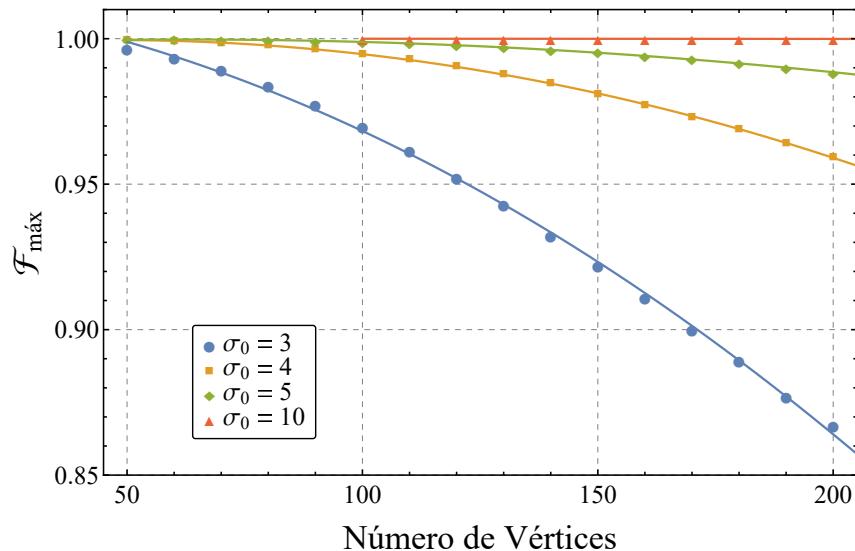


Figura 21 – Fidelidade máxima para diferentes tamanhos da rede C_n , partindo de estados Gaussianos com dispersões $\sigma_0 = 3, 4, 5$ e 10 e respectivos ajustes quadráticos (linhas sólidas). Notemos que a curva com $\sigma_0 = 10$ começa a partir de grafos com 100 vértices, pois é necessário um número grande de vértices para distribuir tal estado Gaussiano respeitando a normalização (vide Eq. 4.27).

não varia com o tamanho do grafo. Este último resultado confirma uma tendência vista no caso retangular: a partir de uma certa distribuição, larga o suficiente, a fidelidade da transferência deixa de ser afetada pelo tamanho da rede, e neste caso, para uma distribuição suave, atingimos transferências de estados quase perfeitas mesmo em redes grandes. Na Figura 22, detalhamos a fidelidade em função do tempo para três diferentes dispersões iniciais, afim de observar o comportamento periódico do estado para mais passos de tempo. Aqui, além de diversos fatores que já foram discutidos, fica evidente no segundo pico de fidelidade que, ao retornar à região inicial, o estado apresenta também fidelidade alta, caracterizando periodicidade praticamente sem perdas para $\sigma_0 = 10$. Por último, apresentamos na Figura 23 a evolução dinâmica de uma CQCT partindo de um estado inicial Gaussiano com $\sigma_0 = 10$ sobre um grafo C_{200} , ilustrando como a informação se propaga ao longo do grafo circular: primeiramente em $t = 0$ no vértice inicial (Alice) prepara o estado inicial Gaussiano, que se espalha por toda a rede, como já pode ser visto em $t = 850$. Em seguida, em $t = 1594$ correspondendo ao pico intermediário entre os picos da fidelidade máxima inicial ($t = 0$) e do vértice antipodal ($t^* = 3187$), vemos que o estado se espalha como duas Gaussianas “filhas”, metade centrada no vértice da Alice e metade centrada no vértice de Bob. Observamos que esse pico na fidelidade correspondendo a $\mathcal{F} \approx 0.5$, reflete a semelhança geométrica com a distribuição Gaussiana inicial, correspondendo a uma superposição cujo estado é dado por

$$|\Psi(t = 1594)\rangle \approx \sum_{n=-N}^N \frac{e^{-n^2/4\sigma_0^2}}{(8\pi\sigma_0)^{\frac{1}{4}}} |n\rangle + \frac{e^{-(m+n)^2/4\sigma_0^2}}{(8\pi\sigma_0)^{\frac{1}{4}}} |m+n\rangle, \quad (4.28)$$

tal que $m = 100$ corresponde ao vértice antipodal. Por fim, em $t^* = 3187$ vemos que o estado inicial centrado em Alice, está agora centrado no vértice antipodal de Bob com $\mathcal{F} \approx 1$, caracterizando uma transferência de estado nesse caso praticamente perfeita.

Vimos até aqui que o estado Gaussiano com uma dispersão suficientemente grande consegue atingir uma excelente transferência de estado independente do tamanho da rede. Isso nos indica que a geometria na qual se deve codificar a informação do estado é relevante, devendo ser suave a fim de minimizar perdas de fidelidade ao longo do caminho. Outro aspecto interessante é como a informação do estado é enviada. O estado se espalha por toda a rede, dispersando-se por todo o grafo e não pode ser interceptado ao longo desse caminho entre Alice e Bob por um eventual espião (Charles), visto que a superposição concebida por Alice só volta a existir no vértice de Bob num tempo t^* específico. Isso implica que o recebimento da informação com alta fidelidade por Bob necessita de uma sincronização entre o tempo de envio e recebimento de tal maneira que Bob só meça o estado no momento de maior fidelidade possível. Qualquer tentativa de Charles interceptar o estado só pode ser feita a partir dos vértices de Alice e Bob e no tempo correto, o que nos indica que, possivelmente, esse protocolo pode ser útil para um envio seguro de informação quântica.

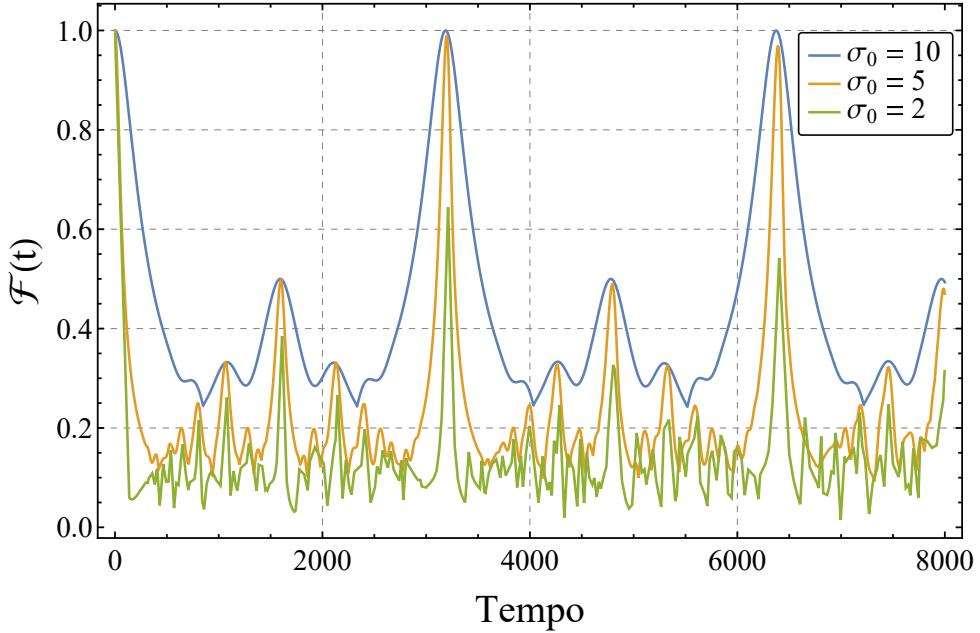


Figura 22 – Fidelidade do estado em função do tempo, partindo de um estado Gaussiano com dispersões iniciais $\sigma_0 = 2, 5$ e 10 , numa rede C_{200} . O pico de fidelidade que ocorre em $t^* = 3187$, corresponde à transferência do estado para a região antipodal. Já o segundo pico para $t = 6374$ representa o retorno do estado à região inicial, demonstrando a periodicidade da caminhada para $\sigma_0 = 10$.

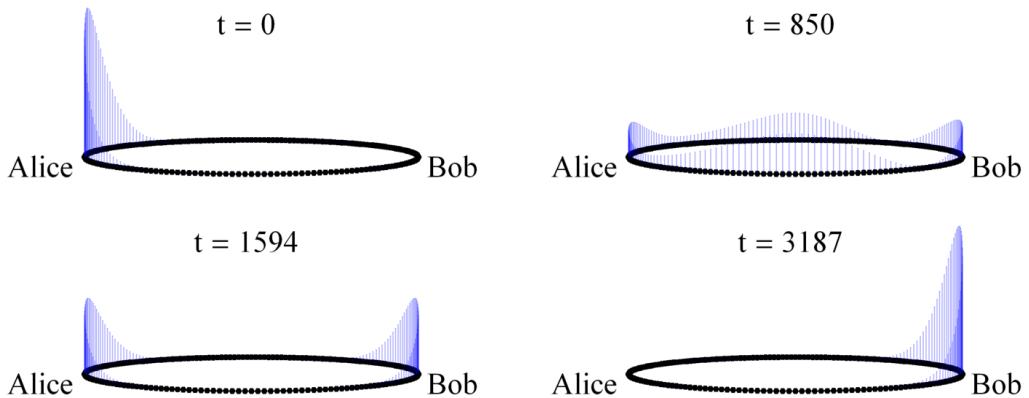


Figura 23 – Distribuições de probabilidade na rede C_{200} ilustrando evolução da caminhada quântica. No instante inicial todo o estado está centrado em Alice, enquanto no tempo $t^* = 3187$ todo o estado está centrado em Bob, na região antipodal do grafo, representando a transferência de estado.

4.3.4 Outras distribuições

Visando explicitar quais fatores são necessários para a obtenção de transferências de estados com alta fidelidade, voltamos nossa atenção para estados com outros tipos de distribuições. Escolhemos três distribuições, apresentadas na Tabela 3. Em particular, nosso interesse reside em evidenciar o impacto na fidelidade do estado devido uma distribuição assimétrica (Gumbel),

Distribuição	Densidade de probabilidades	Variância
	$f(x) = \frac{1}{4s} \operatorname{sech}^2\left(\frac{x}{2s}\right)$	$\sigma_0^2 = \frac{1}{3}\pi^2 s^2$
	$f(x) = \frac{3}{2\pi\gamma} \frac{\gamma^6}{x^6 + \gamma^6}$	$\sigma_0^2 = \frac{1}{2}\gamma^2$
	$f(x) = \frac{1}{\beta} \exp\left(-\frac{x}{\beta} - e^{-x/\beta}\right)$	$\sigma_0^2 = \frac{1}{6}\pi^2\beta^2$

Tabela 3 – Distribuições e suas correspondentes variâncias iniciais. Na coluna à esquerda temos a sobreposição de cada distribuição com uma distribuição Gaussiana, todas com dispersão inicial $\sigma_0 = 5$.

e pela presença de um platô no centro da distribuição³ (Lorentz 6). A análise aqui consiste em, basicamente, repetir para as novas distribuições, os cálculos realizados numericamente para os estados retangular e Gaussiano nas seções anteriores. De fato, além de conseguir observar a transferência dos estados, obtivemos ótimos valores de fidelidade desses estados na região antipodal, e pudemos observar os mesmos aspectos já descritos para a distribuição Gaussiana, tal como a periodicidade. Na Figura 24, comparamos a fidelidade entre os estados Gaussiano, Logístico, de Gumbel e Lorentz 6, todos com dispersão inicial $\sigma_0 = 10$ em C_{200} , nos tempos t^* e T correspondendo, respectivamente, ao tempo da transferência de estado para a região antipodal e um período completo, ou seja, quando o estado volta a se recompor na região inicial.

A partir desses resultados, fica evidente que, apesar de todas as distribuições escolhidas apresentarem bons resultados quanto a transferência do estado - inclusive em distribuições assimétricas - a perda de fidelidade é mínima somente na distribuição Gaussiana. Assim, evi-

³ A escolha da distribuição “Lorentz 6” foi feita com inspiração na distribuição lorentziana. Como não podemos definir uma dispersão para uma distribuição lorentziana, adaptamos sua função distribuição de probabilidade com um novo expoente que tradicionalmente seria 2, para 6.

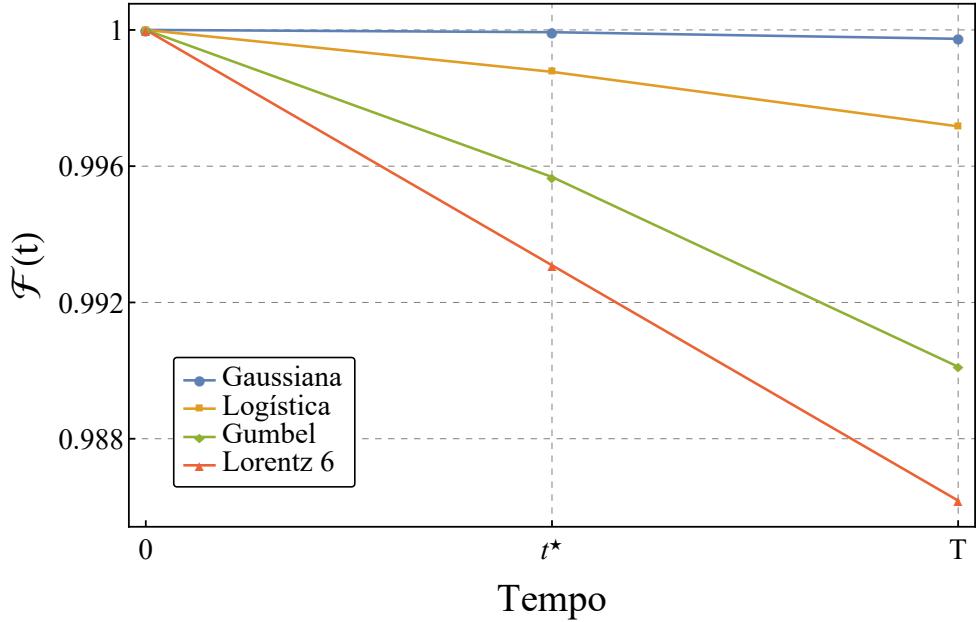


Figura 24 – Fidelidade máxima como função do tempo para diferentes distribuições, dentro de um período completo T . No tempo t^* o estado inicial é transferido para a região antipodal do grafo, já o tempo T corresponde à volta do estado para a região inicial.

denciamos alguns aspectos importantes que devem estar presentes num estado que se deseja transferir com alta fidelidade. O primeiro deles é a suavidade da distribuição: reconstruir um estado com descontinuidades na distribuição (como o estado retangular) torna-se uma tarefa difícil, haja vista que a recomposição do estado se dá a partir de uma superposição de amplitudes de probabilidade. A perda de fidelidade num estado com um platô no centro da distribuição decorre da mesma razão, embora seja bem mais sutil. Além disso, é importante ressaltar que distribuições com “caudas longas” tendem a apresentar problemas de normalização - uma vez que necessitam de uma geometria maior para comportar o estado inteiro - acarretando menor fidelidade na transferência de estado. Ainda, observamos que a perda de fidelidade foi menor para o caso da distribuição logística, indicando que, quanto mais próximo de um perfil Gaussiano, melhor a fidelidade do estado, tanto na transferência quanto na periodicidade.

5 CONCLUSÕES

A proposta de pesquisa deste trabalho foi investigar algumas características físicas de interesse relativas as caminhadas quânticas contínuas no tempo (CQCTs), em particular, a dispersão, fidelidade e periodicidade do estado inicial ao longo do tempo. Nossa análise foi feita nos espaços de posição e momento do caminhante, iniciando a caminhada a partir de um estado local ou a partir de diferentes estados deslocalizados. Tais caminhadas eram realizadas sobre uma linha infinita e também em grafos circulares C_n .

Considerando caminhadas numa linha infinita, obtivemos analiticamente o perfil da distribuição de probabilidade sobre os vértices ao longo do tempo partindo de estados local e deslocalizados. Em particular, observamos que nas CQCTs a dispersão dos estados é balística, ou seja, $\sigma(t) = \alpha t$ similarmente ao que se observa nas CQs discretas no tempo (ORTHEY, 2018) e, enquanto $\alpha = \sqrt{2}$ iniciando a caminhada a partir de um estado local, no caso Gaussiano α é consideravelmente menor quanto maior for a dispersão inicial do estado. Para caminhadas em grafos da família C_n , partindo de estados locais, foram reproduzidos alguns resultados já conhecidos na literatura (KENDON; TAMON, 2010), evidenciando a dificuldade de transferir um estado local em uma rede circular C_n . De fato, apenas grafos pequenos, com $n = 4$, permitem a transferência perfeita de um estado local de um vértice inicial para o vértice antipodal, no entanto, com o aumento do tamanho do grafo, a fidelidade do estado diminui substancialmente. Deste modo, estabelecemos que uma possível alternativa para transferir o estado com alta fidelidade em grafos grandes ($n \geq 100$) seria deslocalizar o estado inicial.

Como primeiro resultado, encontramos uma expressão analítica fechada que nos permitiu calcular a densidade de probabilidade de um estado deslocalizado em função do tempo, para diferentes tamanhos de um grafo C_n e estabelecemos uma forma de calcular a fidelidade do estado levando em consideração sua geometria. Considerando como exemplo um estado retangular (dado por uma distribuição uniforme truncada) observamos uma melhora significativa na fidelidade do estado quando este se reconstituía na região antipodal do grafo, indicando que, a depender da geometria do estado inicial, poderíamos obter transferências com alta fidelidade. Já para um estado inicial Gaussiano, vimos que o padrão de interferência gerado pela superposição das amplitudes de probabilidade fez com que o estado se espalhasse suavemente pelo grafo, primeiro gerando duas “Gaussianas filhas” uma na centrada no vértice inicial e a outra no antipodal, e posteriormente o estado inicial foi reconstituído, porém agora na região antipodal do grafo. Ainda, este efeito se repete, e o estado volta a se recompor na região inicial do grafo, caracterizando periodicidade, também com alta fidelidade. Outro fator importante que observamos foi o tempo de transferência t^* , i.e., o tempo necessário para o estado ser transferido se recompondo na região antipodal, sendo dependente do tamanho do grafo, tal que $t^* \propto n^2$.

Uma vez verificada a possibilidade de transferência dos estados deslocalizados retangular e Gaussiano em grafos grandes, voltamos nossa atenção para outros tipos de distribuições, com o intuito de evidenciar quais são as características desejáveis de um estado inicial que permitem

sua transferência com maior fidelidade. Assim, pudemos elencar quatro fatores que otimizam a transferência de estado e periodicidade em grafos grandes:

- i Suavidade da distribuição - quando há descontinuidades na derivada da distribuição em relação à posição, a perda de fidelidade é notável, vide estados retangulares;
- ii Normalização - distribuições com caudas “longas” apresentam perda de fidelidade, uma vez que necessitam mais vértices do que um estado Gaussiano para garantir sua normalização;
- iii Ausência de pontos de inflexão - a presença de um platô no centro da distribuição dificulta a recomposição do estado pela superposição das amplitudes de probabilidade, diminuindo sua fidelidade;
- iv Dispersão inicial - para obter fidelidades altas em grafos grandes o estado precisa estar suficientemente distribuído, com $\sigma_0 \geq 5$.

Por fim, esperamos que nossos resultados possam contribuir em novos estudos relativos a caminhadas quânticas e informação quântica, e quiçá colaborar em processos de transmissão de informação quântica, uma vez que, a transferência de estado como estudada aqui poderia ser útil, em princípio, como um protocolo de transmissão seguro de informação.

REFERÊNCIAS

- AHARONOV, Yakir; DAVIDOVICH, Luiz; ZAGURY, Nicim. Quantum random walks. **Phys. Rev. A**, APS, v. 48, n. 2, p. 1687, 1993. Citado na página 13.
- AHMADI, Amir et al. Mixing in continuous quantum walks on graphs. **arXiv: Quantum Physics**, 2002. Citado na página 35.
- ALVIR, Rachael et al. Perfect state transfer in laplacian quantum walk. **Journal of Algebraic Combinatorics**, v. 43, 06 2016. Citado na página 15.
- ANGELES-CANUL, Richardo et al. Perfect state transfer, integral circulants, and join of graphs. **Quantum Information & Computation**, v. 10, p. 325–342, 03 2010. Citado na página 34.
- ANTENEODO, C; MORGADO, WAM. Critical scaling in standard biased random walks. **Phys. Rev. Lett.**, APS, v. 99, n. 18, p. 180602, 2007. Citado na página 13.
- ARFKEN, George B. **Mathematical methods for physicists**. [S.l.]: Elsevier, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 28, 57 e 58.
- BARR, K. et al. **Periodicity and perfect state transfer in quantum walks on variants of cycles**. 2013. Citado na página 34.
- BERG, Bernd A. Locating global minima in optimization problems by a random-cost approach. **Nature**, v. 361, n. 6414, p. 708–710, 1993. Disponível em: <<https://www.nature.com/nature/journal/v361/n6414/abs/361708a0.html>>. Citado na página 13.
- BERG, Howard C. **Random walks in biology**. [S.l.]: Princeton University Press, 1993. Citado na página 13.
- BUSEMEYER, Jerome; TOWNSEND, James. Quantum dynamics of human decision-making. **Journal of Mathematical Psychology**, v. 50, p. 220–241, 06 2006. Citado na página 14.
- CEPERLEY, David; ALDER, B. Quantum monte carlo. **Science**, v. 231, 1986. Citado na página 13.
- CHANDRASHEKAR, C. M. Two-component dirac-like hamiltonian for generating quantum walk on one-, two- and three-dimensional lattices. **Scientific Reports**, Springer Science and Business Media LLC, v. 3, n. 1, 2013. ISSN 2045-2322. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/srep02829>>. Citado na página 14.
- CHILDS, Andrew M. Universal computation by quantum walk. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), v. 102, n. 18, 2009. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.180501>>. Citado na página 14.
- ENGEL, Gregory S et al. Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems. **Nature**, v. 446, p. 782–786, 2007. Citado na página 14.
- FARHI, E.; GUTMANN, S. Quantum computation and decision trees. **Physical Review A**, v. 58, p. 915, 1998. Citado na página 25.
- GASIOROWICZ, Stephen. **Quantum Physics**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2003. Citado na página 33.

- GENNES, Pierre-Gilles De. **Scaling concepts in polymer physics.** [S.l.]: Cornell university press, 1979. Citado na página 13.
- GHIZONI, H. S.; AMORIM, E. P. M. Trojan quantum walks. **Brazilian Journal of Physics**, v. 49, p. 168–172, 2019. Citado na página 25.
- GODSIL, Chris. State transfer on graphs. **Discrete Mathematics**, v. 312, p. 129–147, 01 2012. Citado na página 15.
- HOSHINO, Satoshi; ICHIDA, Kozo. Solution of partial differential equations by a modified random walk. **Numerische Mathematik**, Springer, v. 18, n. 1, p. 61–72, 1971. Citado na página 13.
- JOHNSON, Mack. Continuous time quantum walks. 2015. Citado na página 24.
- KEMPE, Julia. Quantum random walks: an introductory overview. **Contemporary Physics**, Taylor & Francis, v. 44, n. 4, p. 307–327, 2003. Citado na página 14.
- KENDON, Viv. Decoherence in quantum walks – a review. **Mathematical Structures in Computer Science**, Cambridge University Press (CUP), v. 17, n. 06, 2007. ISSN 1469-8072. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1017/S0960129507006354>>. Citado na página 14.
- KENDON, Vivien; TAMON, Christino. Perfect state transfer in quantum walks on graphs. **Journal of Computational and Theoretical Nanoscience**, v. 8, 04 2010. Citado 4 vezes nas páginas 15, 26, 34 e 51.
- LOVETT, Neil B et al. Universal quantum computation using the discrete-time quantum walk. **Physical Review A**, APS, v. 81, n. 4, p. 042330, 2010. Citado na página 14.
- MACIEL, Cássio M. **Caminhadas Quânticas de Tempo Contínuo: um Tratamento na Rede Dendrímero Modificado.** Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Amazonas, 2018. Citado 4 vezes nas páginas 8, 14, 17 e 21.
- MANTEGNA, Rosario; STANLEY, H. **An Introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finance.** [S.l.: s.n.], 2000. v. 53. Citado na página 13.
- MOLFETTA, G Di; PéREZ, A. Quantum walks as simulators of neutrino oscillations in a vacuum and matter. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 18, n. 10, p. 103038, 2016. ISSN 1367-2630. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/18/10/103038>>. Citado na página 14.
- NEIGEL, J. E.; AVISE, J. C. Application of a random walk model to geographic distributions of animal mitochondrial dna variation. **Genetics**, v. 135, p. 1209–1220, 12 1993. Citado na página 13.
- NEWMAN, Mark E. **J. Networks: An Introduction.** [S.l.]: Oxford University Press, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- NUMBERPHILE. **The Seven Bridges of Königsberg.** 2016. Disponível em: <<http://youtube.com/watch?v=W18FDEA1jRQ>>. Citado 3 vezes nas páginas 8, 18 e 19.
- ORTHEY, Alexandre C. **Caminhadas Quânticas a Partir de Estados Deslocalizados.** Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Santa Catarina, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 51.

ORTHEY, Alexandre C; AMORIM, Edgard PM. Asymptotic entanglement in quantum walks from delocalized initial states. **Quantum Information Processing**, Springer, v. 16, n. 9, p. 1–16, 2017. Citado na página 45.

PAOLETTI, Teo. **Leonard Euler's Solution to the Konigsberg Bridge Problem**. 2006. Convergence, Volume 3. Citado na página 17.

PEARSON, Karl. The problem of the random walk. **Nature**, v. 72, n. 1865, p. 294, 1905. Citado 3 vezes nas páginas 13, 17 e 22.

PORTUGAL, Renato. **Quantum Walks and Search Algorithms**. [S.l.]: Springer, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 13, 21 e 22.

SCALAS, Enrico. The application of continuous-time random walks in finance and economics. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 362, n. 2, p. 225–239, 2006. Citado na página 13.

SHANNON, Claude Elwood. A mathematical theory of communication. **The Bell system technical journal**, Nokia Bell Labs, v. 27, n. 3, p. 379–423, 1948. Citado na página 15.

SHENVI, Neil; KEMPE, Julia; WHALEY, K. Birgitta. Quantum random-walk search algorithm. **Physical Review A**, American Physical Society (APS), v. 67, n. 5, 2003. ISSN 1094-1622. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.67.052307>>. Citado na página 14.

SOPER, D. E. Position and momentum in quantum mechanics. 2011. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 57.

SPITZER, Frank. **Principles of random walk**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 34. Citado na página 13.

STEWART, Ian. Mathematics: Where drunkards hang out. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 413, n. 6857, p. 686–687, 2001. Citado na página 13.

VENEGAS-ANDRACA, Salvador Elías. Quantum walks: a comprehensive review. **Quantum Inf Process**, Springer, v. 11, n. 5, p. 1015–1106, 2012. Citado na página 13.

VIEIRA, Rafael; RIGOLIN, Gustavo; AMORIM, Edgard P. M. Quantum corralling. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 104, p. 032224, 09 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.104.032224>>. Citado 2 vezes nas páginas 42 e 45.

APÊNDICE A – TRANSFORMADAS DE FOURIER, ESPAÇOS DE MOMENTOS E POSIÇÕES

Faremos uma breve demonstração de alguns resultados matemáticos utilizados ao longo deste trabalho. Iniciamos com o produto interno entre um estado de posição (momento) e de momento (posição). Partindo da ação do operador hermitiano \hat{p} , em sua representação no espaço de posições (SOPER, 2011):

$$\begin{aligned}\hat{p}|p\rangle &= p|p\rangle \\ \langle x|\hat{p}|p\rangle &= p\langle x|p\rangle \\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|p\rangle &= p\langle x|p\rangle.\end{aligned}$$

Da equação diferencial resulta

$$\langle x|p\rangle = \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right). \quad (\text{A.1})$$

Procedendo de forma análoga, utilizando o operador \hat{x} em sua representação no espaço dos momentos:

$$\begin{aligned}\hat{x}|x\rangle &= x|x\rangle \\ \langle p|\hat{x}|x\rangle &= x\langle p|x\rangle \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|x\rangle &= x\langle p|x\rangle.\end{aligned}$$

Assim, obtemos

$$\langle p|x\rangle = \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right). \quad (\text{A.2})$$

Adotando unidades naturais ($\hbar \equiv 1$), da relação entre momento e número de onda, resulta $p = \hbar k = k$. Como o espaço de posições é discreto, utilizamos $j \in \mathbb{N}^+$ para denotar as posições¹ (vértices do grafo), de modo que podemos escrever os resultados anteriores como:

$$\langle j|k\rangle = \frac{e^{ikj}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (\text{A.3})$$

$$\langle k|j\rangle = \frac{e^{-ikj}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{A.4})$$

Os operadores identidade (relações de completeza) são de grande utilidade para obter as leis de transformação entre os espaços de posição e momento. No espaço de posições, dado pelo conjunto dos estados $\{|j\rangle\}$, temos:

$$\mathbb{1} = \sum_{j=1}^N |j\rangle\langle j|. \quad (\text{A.5})$$

¹ Em geral, para grafos de tamanho finito, $j \in [0, n - 1]$, onde n é o número total de vértices. Já para o grafo da Figura 7, $j \in (-\infty, \infty)$.

Já no espaço dos momentos, contínuo, com o número de onda $k \in [-\pi, \pi]$:

$$\tilde{\mathbb{1}} = \int_{-\pi}^{\pi} dk |k\rangle\langle k|. \quad (\text{A.6})$$

Tais definições são consistentes com o postulado do produto interno (SOPER, 2011):

$$|j\rangle = \mathbb{1}|j\rangle = \sum_{j'=1}^N |j'\rangle\langle j'|j\rangle = \sum_{j'=1}^N |j\rangle \delta_{jj'} = |j\rangle, \quad (\text{A.7})$$

$$|k\rangle = \tilde{\mathbb{1}}|k\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} dk' |k'\rangle\langle k'|k\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} dk' |k'\rangle \delta(k' - k) = |k\rangle. \quad (\text{A.8})$$

Utilizando os operadores identidade obtemos as transformações entre estados de posição e momento:

$$|k\rangle = \sum_{j=1}^N |j\rangle\langle j|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=1}^N e^{ikj} |j\rangle, \quad (\text{A.9})$$

$$|j\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} dk |k\rangle\langle k|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{-ikj} |k\rangle. \quad (\text{A.10})$$

Notemos agora que estas leis de transformação não operam da mesma forma quando lidamos com as funções de onda. Denotando por $\Psi(j)$ e $\tilde{\Psi}(k)$ as funções de onda nos espaços de posição e momento, respectivamente, e utilizando as relações de completeza, temos:

$$\tilde{\Psi}(k) = \langle k|\Psi \rangle = \sum_{j=1}^N \langle k|j\rangle\langle j|\Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} \Psi(j). \quad (\text{A.11})$$

E para a transformação inversa:

$$\Psi(j) = \langle j|\Psi \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} dk \langle j|k\rangle\langle k|\Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{ikj} \tilde{\Psi}(k). \quad (\text{A.12})$$

Obtemos assim as transformadas de Fourier das funções de onda, na forma como comumente são apresentadas na literatura (ARFKEN, 2007).

APÊNDICE B – FUNÇÕES DE BESSEL

Uma das diversas representações das funções de Bessel de primeira espécie (ARFKEN, 2007) é a seguinte representação integral

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(x\sin\theta - n\theta)} d\theta, \quad (\text{B.1})$$

onde n é inteiro e representa a ordem da função de Bessel. Para verificar a igualdade da Eq. (3.6), faremos a substituição $\theta = \pi/2 - k$, de modo que $\sin\theta = \cos k$:

$$J_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{3\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dk e^{i(nk + x\cos k - n\frac{\pi}{2})}.$$

Como a integração segue sobre um período completo e aqui lidamos com funções periódicas, podemos tomar o intervalo $[-\pi, \pi]$ e o módulo quadrado da equação,

$$|J_n(x)|^2 = \left| \frac{(-i)^n}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{i(nk + x\cos k)} \right|^2 = \left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{ix\cos k} e^{ink} \right|^2. \quad (\text{B.2})$$

Voltando agora para a Eq. (3.6), tirando da integral o termo independente de k ,

$$\mathcal{P}(j, t) = \left| \frac{e^{-2it}}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{2it\cos k} e^{ikj} \right|^2 = \left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{2it\cos k} e^{ikj} \right|^2, \quad (\text{B.3})$$

que é igual à Eq. B.2 para $|J_n(x)|^2$, apenas trocando $n \rightarrow j$ e $x \rightarrow 2t$. Portanto,

$$\mathcal{P}(j, t) = |J_j(2t)|^2. \quad (\text{B.4})$$

Procedendo analogamente, ao considerar a função de Bessel de ordem $j-n$,

$$J_{j-n}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i[x\sin\theta - (j-n)\theta]} d\theta, \quad (\text{B.5})$$

com a mesma substituição utilizada anteriormente:

$$\begin{aligned} J_{j-n}(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{3\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dk e^{i[x\cos k - (j-n)(\pi/2 - k)]} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{i[x\cos k + k(j-n)]} \left(e^{i\pi/2} \right)^{n-j} \\ &= \frac{i^{n-j}}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{ik(j-n)} e^{ix\cos k}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Desta forma,

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{ik(j-n)} e^{ix\cos k} = i^{j-n} J_{j-n}(x). \quad (\text{B.7})$$