CAMINHADAS QUÂNTICAS DE MÁXIMA ENTROPIA[1]

Andrey Kohls[2], Edgard Pacheco Moreira Amorim[3].

[1] Vinculado ao projeto "Informação e Computação Quântica: aplicações da caminhada aleatória quântica."
[2] Acadêmico do Curso de Licenciatura em Física – CCT – Bolsista PROBIC
[3] Orientador, Departamento de Física – CCT – edgard.amorim@udesc.br

Uma caminhada aleatória é um modelo matemático para determinar a probabilidade de se encontrar um caminhante (partícula) em uma posição no espaço, após uma sequência de passos aleatórios. Para uma caminhada aleatória clássica em uma dimensão, a partícula segue uma sequência de *t* passos, em que para cada passo é realizado o lançamento de uma moeda não viciada. Se o resultado for "cara" a partícula move-se para a esquerda, se for "coroa" ela move-se para a direita. Assim, para uma quantidade muito grande de passos a distribuição final de probabilidades é dada por uma distribuição Gaussiana e a dispersão do caminhante é proporcional à raiz do número de passos $\sigma(t) \sim \sqrt{t}$ (comportamento difusivo). Já uma caminhada quântica em uma dimensão, o caminhante que é uma partícula quântica possui um grau de liberdade interno extra (spin-1/2), além do grau de liberdade externo (posição ou momento). Devido aos fenômenos de interferência e superposição, a probabilidade de localizar a partícula agora é drasticamente distinta da distribuição Gaussiana. Após muitos passos, a distribuição de probabilidades apresenta dois picos afastados e a dispersão do caminhante é diretamente proporcional ao número de passos, ou seja, $\sigma(t) \sim t$ (comportamento balístico).

O caminhante quântico é representado por um *qubit* que tem seu estado expresso por uma função $|\Psi(t)\rangle$ pertencente ao espaço de Hilbert $H = H_C \otimes H_P$ em que H_C é o espaço da moeda quântica, dado pela superposição de estados de spin *up* ($|\uparrow\rangle$) e *down* ($|\downarrow\rangle$), e H_P é o espaço de posições *j* ao longo de uma reta infinita. A caminhada inicia-se com um *qubit* na representação de Bloch, usualmente na origem do sistema de coordenadas (*j=0*),

$$|\Psi(0)\rangle = \left[cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)|\uparrow\rangle + e^{i\beta} sen\left(\frac{\alpha}{2}\right)|\downarrow\rangle\right] \otimes |0\rangle.$$

Para efetuar um passo na caminhada quântica é aplicado ao *qubit* o operador de evolução temporal dado por $U = S(C \otimes \mathbb{1}_P)$, em que $\mathbb{1}_P$ é a identidade no espaço de posições, C é a moeda quântica que gera uma nova superposição no *qubit* e S é o operador de translação condicional que translada as amplitudes de probabilidades de spin *up* para a direita e spin *down* para a esquerda. Ao longo da caminhada podem ser aplicadas diferentes moedas, alternando-as de maneira aleatória ou não. Uma representação de moeda pode ser expressa pela moeda $C(\theta)$, e a partir desta, obtém-se outras duas moedas bastante utilizadas em caminhadas quânticas e úteis para este trabalho: a Hadamard (H) com $\theta = \pi/4$, e Pauli-z (σ_z) com $\theta = 0$, todas representadas abaixo em suas formas matriciais:

$$C(\theta) = \begin{bmatrix} cos(\theta) & sen(\theta) \\ sen(\theta) & -cos(\theta) \end{bmatrix}, \quad H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Apoio: **CNPq** e **fapesc**

A distribuição de probabilidades para a posição de uma partícula ao longo de uma caminhada quântica pode ser relacionada a entropia de Shannon. Quanto menor o valor desta entropia, mais certeza se tem sobre a posição da partícula (dispersão pequena) e quanto maior o valor da entropia, menor é a certeza sobre a posição da partícula (dispersão grande), dado que todas as posições terão probabilidades muito próximas ou iguais. O valor da entropia de Shannon pode ser expresso por: $H(t) = -\sum_{j=-t}^{t} p_j \, log_2(p_j)$, tal que $H_{máx}(t) = log_2(t+1)$ é a entropia máxima. Quando o parâmetro $\theta(t)$ da moeda varia no tempo segundo, $\theta(t) = \frac{\pi}{4}\delta\big(sen(\pi \, log_2 t)\big)$, tal que $\delta(x) = 1$ para $x = 0$ e $\delta(x) = 0$ para $x \neq 0$, portanto, alternando entre as moedas Hadamard para passos de tempo tais que $t = 2^n$ $(n \in \mathbb{N}^*)$ e Pauli-Z para demais passos de tempo.

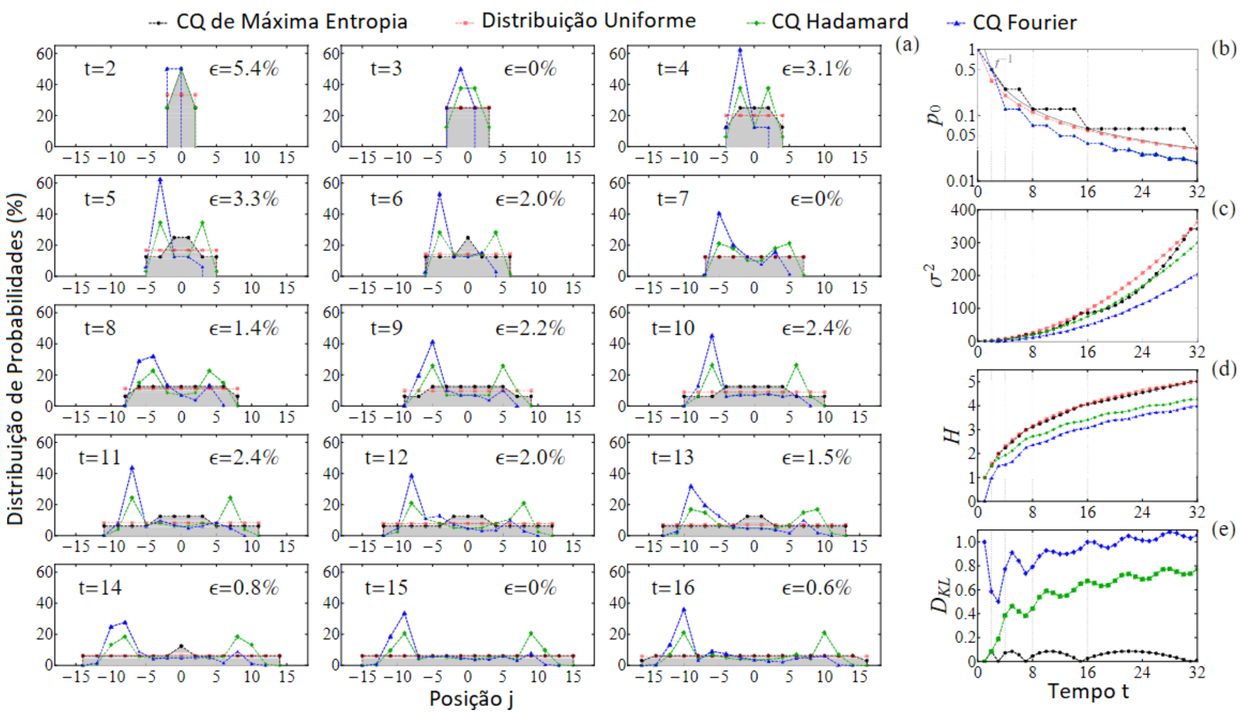

Figura 1. Comparação entre as caminhadas quânticas (CQ) de máxima entropia (círculo preto), Hadamard (losango verde) e Fourier (triângulo azul) junto a distribuição uniforme correspondente (quadrado vermelho transparente): (a) distribuição de probabilidades indo de $t = 2$ até $t = 16$ onde $\epsilon = 1 - H(t)/H_{máx}(t)$, (b) a probabilidade de retorno da partícula para a posição de origem, (c) variância da posição $\sigma^2 = \langle j^2 \rangle$-$\langle j \rangle^2$, (d) entropia de Shannon e (e) divergência de Kullback-Lieber para cada caminhada com respeito a distribuição uniforme.

Figura 1 mostra que a caminhada evoluída no tempo pela moeda $\theta(t)$ se aproxima muito bem da entropia de Shannon máxima ao longo de toda a caminhada, tendo valores iguais ao máximo nos passos de tempo $t = 2^n - 1$ $(n \in \mathbb{N}^*)$ mas com uma pequena diferença para os demais passos, que fica cada vez menor conforme n aumenta, tal que para $n \to \infty$ teremos $H \to H_{max}$. Verificamos resultados semelhantes partindo de um estado inicial deslocalizado.

Palavras-chave: Caminhada Quântica. Dispersão. Entropia de Shannon.