



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS

INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS

BACHARELADO EM FÍSICA

Transporte quântico em redes do tipo anel

Iara Lima dos Santos

Manaus - AM

Agosto de 2019

Iara Lima dos Santos

Transporte quântico em redes do tipo anel

Monografia de Graduação apresentada ao Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal do Amazonas como requisito parcial para a obtenção do grau de bacharel em física.

Orientador

Dr. Mircea Daniel Galiceanu

Universidade Federal do Amazonas

Instituto de Ciências Exatas

Manaus - AM

Agosto de 2019

Monografia de Graduação sob o título Transporte quântico em redes do tipo anel apresentada por Iara Lima dos Santos e aceita pelo Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal do Amazonas, sendo aprovada por todos os membros da banca examinadora abaixo especificada:

Dr. Mircea Daniel Galiceanu
Orientador
Departamento de física
Universidade Federal do Amazonas

Me. Cássio Macêdo Maciel
Departamento de de física
Universidade Federal do Amazonas

Dr. Octavio Daniel Rodriguez Salmon
Departamento de física
Universidade Federal do Amazonas

Manaus - AM, 14 de agosto de 2019.

A minha mãe, Lindamar de Araújo Lima, e a
toda sociedade brasileira, como retribuição.

Agradecimentos

É com muito carinho que agradeço a todo amor, cuidado, moradia e financiamento que meus pais ofereceram durante o desenvolvimento deste trabalho e no decorrer da graduação, a minha irmã por ser tão acolhedora e compreensiva, ao meu irmão, pelos momentos de discussão intermináveis, ao Mircea Galiceanu, por ser um orientador atencioso, com excelentes conselhos e que é tão fácil de conversar, ao Bonifácio Lima, pelas dicas para este trabalho, ao Emerson Souza, por sempre provocar um caos incomodável e construtivo, a Thais Martins, por ser uma amiga amorosa e sensata, ao Cássio Maciel, a Roberta Lorena, por perambular pela UFAM comigo, ao Igor Padilha, por ser um professor tão dedicado e empolgado sobre a física, ao Haroldo Guerreiro, por sempre ser tão exigente com os relatórios em laboratório, ao Hidembergue Frota, por seus conselhos e histórias, ao Sandro Bitar, por suas aulas incríveis de álgebra linear, a Débora Costa, por embarcar tão facilmente nas conversas sobre ciência, a Victória Maia, ao Mateus, Luana, Raul, Noah, Kaio, colegas da sala de iniciação científica, colegas do grupo de pesquisa de redes complexas e professores do departamento de física. Estar motivada para fazer este trabalho é devido a todo esse apoio recebido.

É melhor debater uma questão sem resolvê-la, que resolvê-la sem debater

Joseph Joubert

Transporte quântico em redes do tipo anel

Autor: Iara Lima dos Santos

Orientador: Dr. Mircea Daniel Galiceanu

Resumo

Neste trabalho, estudaremos o transporte através do modelo de tempo contínuo das caminhadas aleatórias no nível clássico (CTRW) e quântico (CTQW) para redes fechadas de vários tamanhos. Grandezas como a probabilidade de transição, a probabilidade de voltar na origem e a ineficiência do transporte foram determinadas analiticamente para redes triangulares e numericamente para redes de dimensão superior (5, 7 e 100). Redes fechadas com maior número de vértices apresentaram-se mais eficientes nos dois casos CTRW e CTQW, mas ao comparar os dois modelos, o transporte mostrou-se mais eficiente no caso quântico.

Palavras-chave: caminhada quântica de tempo contínuo, eficiência do transporte clássico e quântico, redes fechadas.

Transporte quântico em redes do tipo anel

Autor: Iara Lima dos Santos

Orientador: Dr. Mircea Daniel Galiceanu

Abstract

In this work, we study the transport in the framework of classical random walks (CTRW) and continuous time quantum walks (CTQW) for ring networks of various sizes. Quantities such as transition probability, probability to return to the origin, and transport inefficiency were determined analytically for triangular networks and numerically for larger networks (5, 7 and 100). Ring networks with higher number of vertices were more efficient for both cases: CTRW and CTQW, but comparing the two models, the transport is more efficient in the quantum case.

Keywords: continuous time quantum walk, efficiency of classical and quantum transport, ring networks.

Lista de figuras

Figura 1 – Representação de caminhada aleatória unidimensional. . . .	18
Figura 2 – Posição em função do número de passos, para dois caminhan- tes distintos, com probabilidades iguais de ir para esquerda ou direita.	19
Figura 3 – Esquema das sete pontes entre as margens c e d , que ligam as ilhas a e b	21
Figura 4 – Grafo que representa o problema das pontes de Königsberg, onde vértices representam as margens e ilhas, e as pontes correspondem às arestas.	21
Figura 5 – Grafo da vizinhança dos oceanos terrestres. Cada oceano é um vértice e as possibilidades de ir ou vir entre eles são representadas pelas arestas.	22
Figura 6 – Garfo com 5 vértices e 7 arestas.	22
Figura 7 – Representação gráfica de uma cadeia de Markov.	27
Figura 8 – Representação de caminhada quântica.	38
Figura 9 – Exemplos de redes fechadas bidimensionais.	43
Figura 10 – Probabilidade quântica de retorno na rede triangular.	45
Figura 11 – Probabilidade quântica de retorno.	47
Figura 12 – Probabilidade clássica de retorno.	48
Figura 13 – Comparação entre a eficiência do transporte clássico e quântico.	49
Figura 14 – Rede triangular: três nós, cada nó está ligado a outros dois. .	55

Lista de abreviaturas e siglas

CTRW	Caminhadas aleatórias de tempo contínuo
CTQW	Caminhadas quânticas de tempo contínuo

Sumário

1	INTRODUÇÃO	13
2	REFERENCIAL TEÓRICO	16
2.1	Caminhadas aleatórias	17
2.2	Grafos	20
2.3	Cadeias de Markov	25
2.3.1	Processo estocástico	25
2.3.2	Processo estocástico com estados discretos	26
2.3.3	Processos markovianos	26
2.3.4	Cadeias de Markov com tempo discreto - CMTD	27
2.3.5	Teorema I	29
2.3.6	Teorema II	29
2.3.7	Teorema III	29
2.3.8	Cadeias de Markov com tempo contínuo - CMTC	30
2.3.8.1	CTRW: caminhadas aleatórias de tempo contínuo	31
2.4	Mecânica quântica	33
2.4.1	Postulados da mecânica quântica	34
2.4.1.1	Espaço de estados	34
2.4.1.2	O processo de medida	35
2.4.1.3	Evolução temporal	36
2.4.1.4	Composição de sistemas	37
2.5	Caminhadas quânticas	37
2.5.1	Modelo de tempo discreto	38
2.5.2	Modelo de tempo contínuo	40
2.6	Eficiência das CTRW e CTQW	41
3	METODOLOGIA	43
4	RESULTADOS	44

4.1	Rede triangular: comparação entre resultados analíticos e numéricos	44
4.2	Probabilidades de transição quânticas: Probabilidade de retorno	46
4.3	Eficiência do transporte	47
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	50
	Referências	52
	APÊNDICE A – PARÂMETROS PARA REDES TRIANGULARES	55
	APÊNDICE B – RELAÇÃO DE RECORRÊNCIA	59
	APÊNDICE C – EQUAÇÃO DE DIFUSÃO	60
	APÊNDICE D – PROGRAMA EM PYTHON	61

1 Introdução

Estudar o passeio aleatório clássico levou a aplicações diversas como o movimento de moléculas em gases ideais, o problema da saída estreita em biofísica (1), modelagem de ações no mercado financeiro (2), etc. Com o intuito de ter um tratamento análogo para caminhantes quânticos surgiu a caminhada quântica.

Fenômenos quânticos mostram-se "estranhos", vistos a partir do que é observado num ambiente macroscópico, ou mesmo dos conceitos mais intuitivos da física clássica. Por exemplo, imagine quão difícil poderia ser aceitar que uma bola de bilhar gira em todas as direções ao mesmo tempo. De fato, esse não é o comportamento dela, embora uma partícula com propriedades quânticas possa atuar de maneira análoga a esta situação.

Em geral, didaticamente, a física quântica é apresentada em 4 postulados que definem o espaço em que é modelado o sistema e seus elementos, os operadores e suas restrições para representar um observável físico, evolução temporal e composição de sistemas. Há algumas interpretações da mecânica quântica, é padrão ensinar a de Copenhague, desenvolvida entre 1925 e 1927 por Niels Bohr e Werner Heisenberg. A relação de postulados proposta acima é baseada nesta interpretação. Nela, um sistema físico geral não tem propriedade física definida antes de ser medida (a tal propriedade). A mecânica quântica pode prever apenas a distribuição de probabilidade das possíveis medidas. O ato de medir afeta o sistema causando a redução para algum dos possíveis valores. Esse evento é chamado colapso da função de onda, e medir é quebrar a coerência quântica dessa função de onda.

A consequência mais relevante das caminhadas quânticas é não haver trajetória, pois classicamente, tem-se que o objeto caminha passando por determinados pontos espaciais em certo tempo. Enquanto que, o caminhante quântico tem uma distribuição de probabilidade associada a posição em determinado tempo. A localização só é dada ao ser medida. No entanto, o que torna

interessante as caminhadas quânticas é justamente o comportamento antes da realização da medida.

Richard Feynman propôs o conceito de computadores quânticos (3), que processam informação segundo os fundamentos da mecânica quântica. Para tanto, é necessário reformular como são feitos algoritmos. Os mais conhecidos são o de fatoração de números primos de Shor(4) e o que faz buscas em bancos de dados de Grover(5). Há uma série de algoritmos quânticos desenvolvidos a espera da tecnologia necessária para testá-los, e casos mais simples (com 2-qubits e 3-qubits) foram estudados e testados nos trabalhos de Watson et al.(6) e Roy et al.(7). Caminhadas quânticas podem, entre inúmeras aplicações, modelar fenômenos quânticos, pesquisas em bases de dados, caracterizar redes ou determinar o isomorfismo de grafos (8).

Há dois modelos distintos no tratamento de caminhadas quânticas: tempo discreto e contínuo. Eles serão discutidos no decorrer deste trabalho. Embora o foco será para o modelo de tempo contínuo. Este trabalho busca determinar a probabilidade de retorno quântica e a eficiência em redes fechadas utilizando-se da aplicação do método de caminhadas quânticas de tempo contínuo e comparar essas com seus equivalentes clássicos. Algo semelhante ao realizado por Xu(9), no entanto, a rede deste artigo é estrela (um nó central, todos os outros conectados a ele).

O estudo aqui presente está dividido em: referencial teórico, metodologia, resultados e considerações finais. A teoria foi dividida em varias seções, aonde apresentamos os passeios aleatórios clássicos, um pouco sobre grafos, cadeias de Markov em tempo contínuo e discreto (devido sua importância nas CTQW), conceitos de mecânica quântica básicos e a descrição dos modelos de caminhadas quânticas em tempo discreto e contínuo. Os resultados foram obtidos para o caso de uma rede com três vértices analítica e numericamente, através de um programa desenvolvido em python que encontra-se no apêndice D. E para redes de 3,5, 7 e 100 vértices numericamente apenas. Nas considerações finais foi dado significado aos resultados com a comparação das grandezas clássicas

e quânticas.

2 Referencial teórico

A produção de conhecimento científico é desafiadora, pois exige curiosidade, criatividade e modéstia do agente. A primeira é o que motiva o processo, ela vem de um olhar questionador para o mundo. Depois de internalizar a curiosidade, a segunda abre um leque de possibilidades para a explicação do fenômeno, mas de todas essas opções, talvez nenhuma mostre-se consistente com a realidade. Portanto, admitir que as hipóteses propostas não explicam o problema em questão, requer modéstia.

No parágrafo anterior, de uma maneira pouco criteriosa, foi descrito passos importantes do método científico. A visão atual desse tem sua origem nas obras de Bacon(10) e Descartes(11). O primeiro concentrava-se na necessidade de um sistema lógico baseado na experiência, e o segundo, deu mais ênfase para a busca pela verdade através da razão. Esses são os dois eixos principais da metodologia científica.

Para explicar fenômenos naturais, é necessário abstrair o problema de forma a desprender-se de aspectos não relevantes, que evidentemente não estão relacionados com o que se quer analisar, e por uma sequência lógica de etapas, muitas vezes baseada em métodos matemáticos, modelar o processo. Esta modelagem está suscetível a testes, e a experiência dirá quão próxima da realidade ela é. Alguns exemplos interessantes para este trabalho são: O movimento de partículas orgânicas ou inorgânicas em líquidos(12), descrição da procura do cuco por alimento (13), caminhadas quânticas de fótons correlacionados (14), entre outros.

Há momentos na história da ciência que ocorrem revoluções, estas levam a mudanças de paradigma em diferentes níveis. O nascimento da mecânica quântica foi um desses momentos. O ponto central da ideia de quantização de energia é o artigo de 1905, de Albert Einstein: "Sobre um ponto de vista heurístico a respeito da produção e transformação da luz", nele é apresentado o quantum de luz. Esta ideia ganhou atenção e foi objeto de estudo para muitos

pesquisadores da época, a produção deles deu consistência a hipótese.

O desenvolvimento da mecânica quântica permitiu aplicações tecnológicas que mudaram o mundo, como o laser, transistores, relógio atômico e até mesmo a geração de números aleatórios para criptografia.

Uma proposta atual é usar a lógica da mecânica quântica na construção de algoritmos computacionais. Computadores clássicos tratam a informação com lógica binária, onde qualquer dado pode ser "traduzido" numa sequência de bits. O bit pode assumir o valor de 0 ou 1. Usar a lógica quântica para o bit é vê-lo como uma superposição dos estados 0 e 1, com suas respectivas probabilidades, chamado qbit. E isto viabiliza um processamento de informações mais eficiente que o modelo clássico, que motiva pesquisas, enquanto a fotônica trata da elaboração de dispositivos, análogos aos circuitos eletrônicos, mas com luz. A informação quântica investiga a maneira mais eficiente de aproveitar as características quânticas desses dispositivos. No entanto, para utilizar-se dos efeitos quânticos nesses equipamentos é necessário não haver perda de coerência, que significa o colapso da função de onda para um dado valor, de forma a haver perda de informação.

2.1 Caminhadas aleatórias

Em 1827, ao olhar através de um microscópio, partículas que compõem o pólen na água, Robert Brown vê que essas partículas realizam um movimento não vital (12). Em 1905, Albert Einstein atribui este movimento aos sucessivos choques entre a partícula e as moléculas que compõem a água e nota que o mesmo tem caráter probabilístico(15).

Nas décadas seguintes, outros cientistas contribuem significativamente, de maneira a generalizar o tratamento para este problema. Será dado destaque a Mark Kac(16), que aborda a ideia de caminhada aleatória. Esta abordagem é conhecida como o caminhar do bêbado.

Considere uma pessoa na origem de uma reta graduada, ela pode mover-

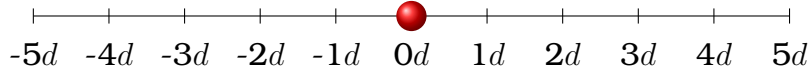


Figura 1 – Representação de caminhada aleatória unidimensional.

se para esquerda ou direita sobre a mesma, com probabilidades iguais a p e q , respectivamente, e $p = 1 - q$, pois a única ação do bêbado será dar um passo numa das duas direções. como ilustrado na figura 1. Cada passo possui comprimento d . Depois de N passos onde o caminhante estará?

Este é o caso unidimensional, com passo fixo da caminhada aleatória. Os eventos andar para esquerda ou direita são mutuamente independentes. n_r é o número de passos para direita e n_l esquerda. De forma que a posição será $x(N) = md$, onde $m = n_r - n_l$, após os N passos. Assim responder a pergunta proposta é calcular a probabilidade $P_N(m)$ de encontrar o bêbado na posição $x(N)$. A trajetória realizada por um único caminhante é aleatória e muitas vezes irrepetível, como pode ser visto na figura 2.

Como são eventos independentes, a probabilidade será a mutiplicação das probabilidades em cada passo(17):

$$p.p.p.p...p.q.q.q...q = p^{n_l}.q^{n_r} \quad (2.1)$$

No entanto, deve-se ter essa probabilidade para todas as combinações possíveis em que $n_l + n_r = N$, então o número de possibilidades distintas é(18):

$$\frac{N!}{n_l!n_r!} \quad (2.2)$$

Assim a probabilidade, após N passos, é:

$$P_N(n_r, n_l) = \frac{N!p^{n_l}q^{n_r}}{n_r!n_l!} \quad (2.3)$$

Como x é o deslocamento efetivo, e depende de m , já que d é apenas o comprimento do passo, ou seja, uma constante. É interessante escrever a probabilidade em termos de m , $P_N(m)$. Para tanto, combinam-se as equações $m = n_r - n_l$ e $N = n_r + n_l$, e chega-se a:

$$n_r = \frac{N + m}{2} \quad (2.4)$$

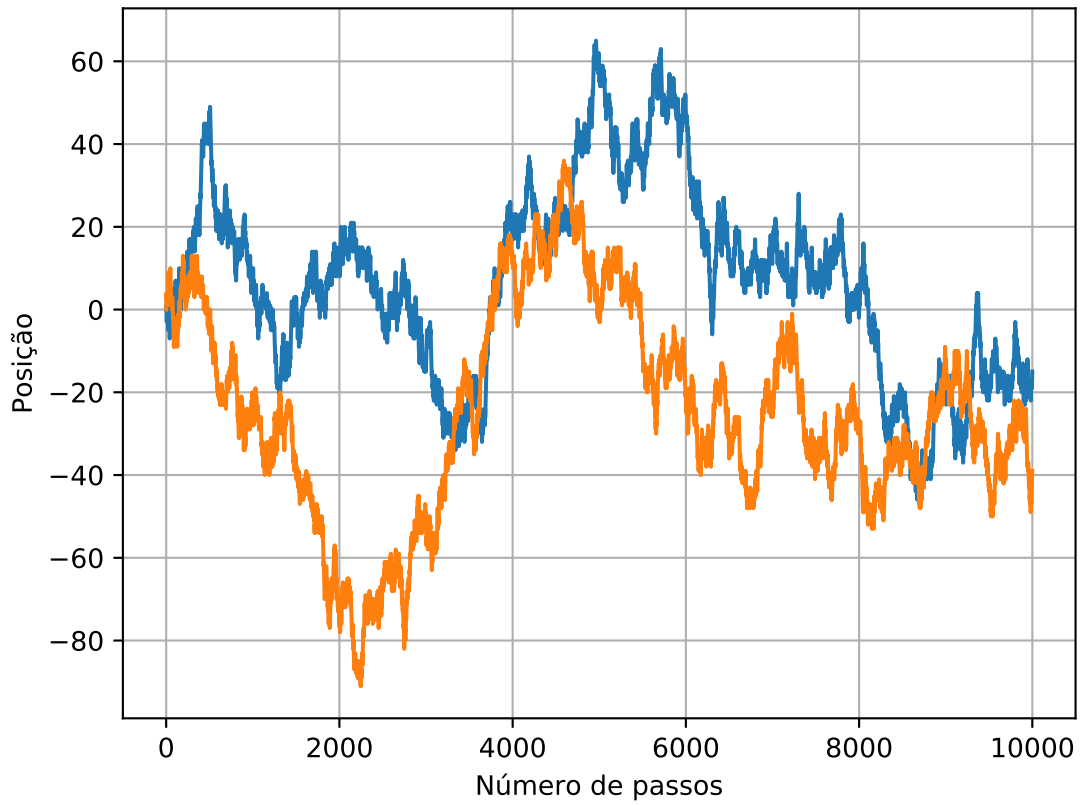


Figura 2 – Posição em função do número de passos, para dois caminhantes distintos, com probabilidades iguais de ir para esquerda ou direita.

$$n_l = \frac{N - m}{2} \quad (2.5)$$

Que fazendo as devidas substituições:

$$P_N(m) = \frac{N!}{\left(\frac{N+m}{2}\right)! \left(\frac{N-m}{2}\right)!} p^{\frac{N-m}{2}} q^{\frac{N+m}{2}} \quad (2.6)$$

A equação (2.6) obedece a seguinte relação de recorrência, como mostrado no apêndice B:

$$P_{N+1}(m) = pP_N(m - 1) + qP_N(m + 1) \quad (2.7)$$

E com N grande pode-se aproximá-la para uma função contínua $\mu(x, t)$, onde $t = N\tau$ e $x = md$. τ é o tempo para realizar um passo. Detalhes no apêndice C:

Ao reescrever a relação de recorrência em termos de $\mu(x, t)$, utilizar a aproximação de série de Taylor até segunda ordem e $1 = p + q$. Chega-se a forma geral da caminhada aleatória:

$$\frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \mu}{\partial t^2} + \frac{\partial \mu}{\partial t} = -\frac{d}{\tau}(q - p) \frac{\partial \mu}{\partial x} + \frac{d^2}{2\tau} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} \quad (2.8)$$

Ela indica como ocorre a caminhada, e é conhecida como expressão geral de difusão, onde o termo $\mu(x, t)$ é a concentração de partículas por unidade de comprimento, em torno de x num dado instante.

Para uma análise detalhada do movimento browniano, das diferentes e principais abordagens consulte Silva e Lima(19).

Como aplicação, o caso em que tem-se as mesmas probabilidades de ir para a direita ou para esquerda, ou seja, $p = q = \frac{1}{2}$, faz a expressão geral ficar:

$$\frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \mu}{\partial t^2} + \frac{\partial \mu}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} \quad (2.9)$$

com coeficiente de difusão:

$$D = \frac{d^2}{2\tau} \quad (2.10)$$

No limite em que $\tau \frac{\partial^2 \mu}{\partial t^2} \ll \frac{\partial \mu}{\partial t}$, tem-se:

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} \quad (2.11)$$

Esta é a forma mais comum da equação de difusão. Note que se não for o caso unidimensional, o termo $\frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2}$ torna-se o laplaciano de μ .

2.2 Grafos

O conceito de grafos desenvolveu-se a partir da modelagem para a solução do problema das pontes de Königsberg, em 1736, por Leonhard Euler. Ele tratava de encontrar um caminho que passasse uma vez por cada ponte do parque de Königsberg (atual Kaliningrado). Uma ilustração do problema é mostrada na figura 3. O grafo que corresponde a este problema pode ser visto na figura 4. Euler mostrou que este problema tem solução negativa.

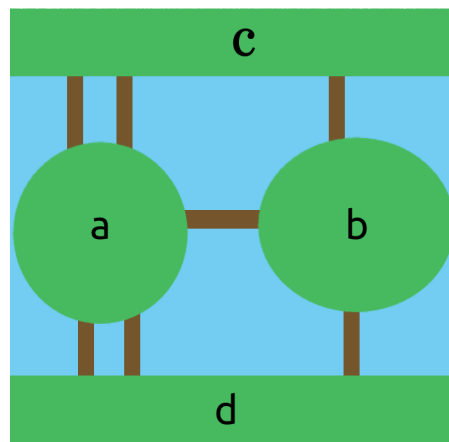


Figura 3 – Esquema das sete pontes entre as margens c e d , que ligam as ilhas a e b .

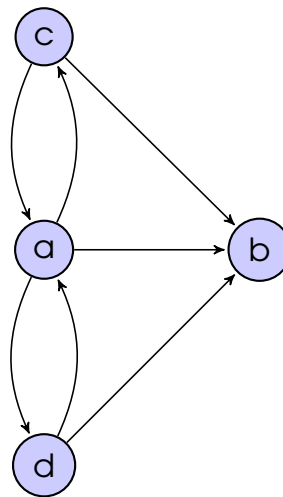


Figura 4 – Grafo que representa o problema das pontes de Königsberg, onde vértices representam as margens e ilhas, e as pontes correspondem às arestas.

Considere um conjunto V , será denotado $V^{(2)}$ todos os pares não-ordenados dos elementos de V . Se V possui n partes então $V^{(2)}$ tem $\frac{n(n-1)}{2}$, que é o arranjo de n elementos dois a dois. Esses itens de $V^{(2)}$ são subconjuntos de V com cardinalidade 2. A forma de cada elemento é $\{ab\}$ onde a e $b \in V$ e $a \neq b$.

Um grafo é o par (V, A) , onde V é um conjunto qualquer (vértices) e A é um subconjunto de $V^{(2)}$ (arestas). Neste trabalho é interessante restringir-se a V ter um número finito de elementos. Como exemplo veja o grafo dos oceanos

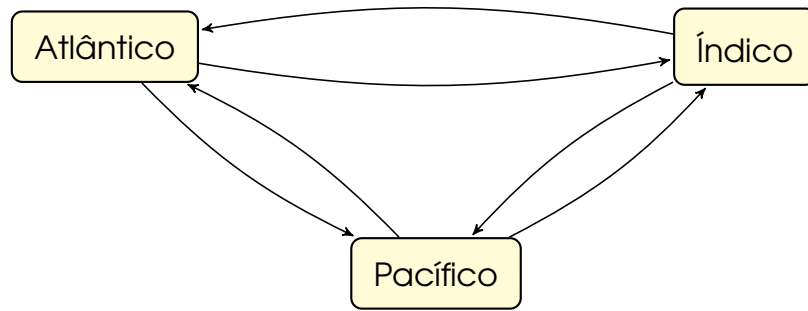


Figura 5 – Grafo da vizinhança dos oceanos terrestres. Cada oceano é um vértice e as possibilidades de ir ou vir entre eles são representadas pelas arestas.

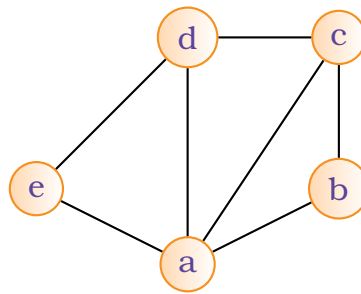


Figura 6 – Garfo com 5 vértices e 7 arestas.

do planeta na figura 5.

Uma maneira de representar um grafo matematicamente é utilizar uma matriz. A matriz de adjacência (A) representa a forma do grafo, como cada vértice liga-se aos outros. Portanto, os elementos dessa matriz serão, com $i \neq j$:

$$A_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se existir uma ligação entre os nós } i \text{ e } j \\ 0, & \text{se não existir} \end{cases} \quad (2.12)$$

Para o exemplo na figura 6, a matriz de adjacência fica, relacionando os vértices às colunas e linhas $a = 1, b = 2, c = 3, d = 4$ e $e = 5$, da seguinte forma:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Outra matriz de relevância no estudo de como ocorre a propagação de informa-

ção num grafo é a matriz laplaciano. Ela possui este nome por ser o equivalente ao laplaciano na expressão geral de difusão, que foi comentada anteriormente na equação (2.11). Aqui será desenvolvido algo semelhante ao feito por Newman et al.(20) e Maciel et al.(21).

Se uma grandeza física φ se propaga por um grafo, então a variação no tempo dessa grandeza no nó i é o quanto é retirado ou colocado nesse nó, dessa grandeza. A seguinte expressão caracteriza a variação, no tempo, de φ no vértice i :

$$\frac{d\varphi_i}{dt} = D \sum_j A_{ij}(\varphi_j - \varphi_i). \quad (2.14)$$

Pois, as quantidades de φ na vizinhança do nó i é que irão contribuir, em um curto intervalo de tempo, no quanto dessa grandeza sai ou entra no vértice. E a constante D é chamada constante de difusão.

Distribuindo a somatória:

$$\frac{d\varphi_i}{dt} = D \left(\sum_j A_{ij}\varphi_j - \varphi_i \sum_j A_{ij} \right).$$

Observe que o termo $k_i = \sum_j A_{ij}$ dá o número de arestas conectadas ao vértice i ; ele é chamado grau do nó i . Para escrevê-lo dentro da somatória, será colocado um delta de Kronecker multiplicado a ele. Desta forma o índice i ou j neste termo é equivalente.

$$\frac{d\varphi_i}{dt} = D \left(\sum_j A_{ij}\varphi_j - \varphi_j k_i \delta_{ij} \right) = D \left(\sum_j (A_{ij} - k_i \delta_{ij})\varphi_j \right).$$

A forma matricial dessa expressão é:

$$\frac{d\varphi}{dt} = D(\mathbf{A} - \mathbf{D})\varphi \quad (2.15)$$

onde φ é um vetor coluna de componentes $\varphi = \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\}$, \mathbf{A} é a matriz de adjacência e \mathbf{D} é uma matriz cujos elementos da diagonal principal são os graus de cada vértice da rede e os elementos não diagonais são nulos.

É possível definir uma nova matriz, dada pelos termos entre os parênteses:

$$\mathbf{L} \equiv \mathbf{A} - \mathbf{D}, \quad (2.16)$$

de maneira que a equação (2.15) fica:

$$\frac{d\varphi}{dt} - D\mathbf{L}\varphi. \quad (2.17)$$

Note que esta expressão é muito semelhante a obtida quando foi tratada a caminhada aleatória clássica, na equação (2.11). Como foi comentado inicialmente nesta seção, a matriz \mathbf{L} é chamada laplaciano devido a comparação entre as equações (2.17) e (2.11), por essa matriz fazer o papel do operador laplaciano. Essa matriz é de grande importância no estudo de caminhadas aleatórias em redes (20). Os elementos da matriz laplaciano podem ser expressos como:

$$L_{ij} = \left\{ \begin{array}{ll} k_i, & \text{se } i = j \\ -1, & \text{se haver ligação entre os vértices } i \text{ e } j \\ 0, & \text{caso contrário} \end{array} \right\}. \quad (2.18)$$

A matriz laplaciano do grafo da figura 6 é:

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Para resolver a equação de difusão (2.17) reescreve-se o vetor φ como combinação linear dos autovetores do laplaciano.

$$\varphi = \sum_i a_i(t) \mathbf{q}_i, \quad (2.20)$$

de maneira que a equação (2.17) fica:

$$\frac{d \sum_i a_i(t) \mathbf{q}_i}{dt} = D\mathbf{L} \sum_i a_i(t) \mathbf{q}_i = D \sum_i a_i(t) \mathbf{L} \mathbf{q}_i, \quad (2.21)$$

que como \mathbf{q}_i é autovetor de \mathbf{L} , então $\mathbf{L}\mathbf{q}_i = \lambda_i\mathbf{q}_i$, onde λ_i é o autovalor associado ao autovetor \mathbf{q}_i . Assim,

$$\sum_i \left(\frac{da_i(t)}{dt} \mathbf{q}_i - D a_i(t) \lambda_i \mathbf{q}_i \right) = 0. \quad (2.22)$$

Os autovetores da matriz laplaciano são ortogonais (se não forem, é possível ortogonalizar), então:

$$\frac{da_i(t)}{dt} - D a_i(t) \lambda_i = 0. \quad (2.23)$$

Resolvendo a equação diferencial ordinária encontramos como solução:

$$a_i(t) = a_i(0) e^{-D \lambda_i t}. \quad (2.24)$$

Portanto, dada uma condição inicial e a matriz laplaciano de um grafo é possível encontrar a função $a_i(t)$ para cada autovetor, de forma que o vetor φ é determinado, usando a equação (2.20), ou seja, encontra-se como a grandeza associada a este vetor varia no tempo para cada componente.

2.3 Cadeias de Markov

2.3.1 Processo estocástico

A análise, no decorrer do tempo, de uma variável, por exemplo o número de sapatos vendidos por dia em dada sapataria leva a necessidade de estabelecer: variável estudada e o parâmetro usado como referência. No exemplo, aquela é o número de sapatos e este o tempo. Variáveis aleatórias são aquelas que obedecem a uma certa distribuição de probabilidade.

Um processo estocástico é um conjunto de variáveis aleatórias $X(t)$ indexadas por um parâmetro t . Normalmente, essa dependência é temporal, portanto $t \in \mathbf{R}_+$. Já $X(t)$ é definido dentro do **espaço de estados**, ε , ele estabelece todos os valores possíveis para $X(t)$. Classificam-se processos aleatórios quanto:

- Espaço de estados:

- Discreto (cadeia): Estados enumeráveis.
 - Contínuo (processo): Caso contrário.
- Tempo(parâmetro):
 - Discreto: t enumerável.
 - Contínuo: caso contrário.

2.3.2 Processo estocástico com estados discretos

Para modelar o movimento browniano, na seção anterior, foi feita uma série de restrições: unidimensional, passo fixo e probabilidades iguais de ir para esquerda ou direita. Além disso, o número de estados possíveis para o caminhante era discreto, pois o passo foi cravado, ou seja, $-N \leq x \leq N$ com $x \in \mathbb{Z}$. Portanto, $2N$ estados possíveis. Isso é um exemplo de um processo estocástico com estados discretos e finito.

2.3.3 Processos markovianos

De maneira simples, se um processo de sucessivas transições aleatórias, o estado seguinte depende apenas do presente, este processo é denominado markoviano (22). A equação (2.7), relação de recorrência da caminhada aleatória é uma propriedade de processos markovianos.

O foco desta seção será em processos markovianos com espaço de estados discreto e probabilidades de transição estacionárias, ou seja, constantes no tempo. Além disso o número de estados é finito. Essas especificações são importantes para o estudo de caminhadas aleatórias em grafos, exceto a de ser estacionária, esta é apenas para tornar análise simples. Uma aplicação desta metodologia pode ser encontrada em Meyn e Tweedie(23).

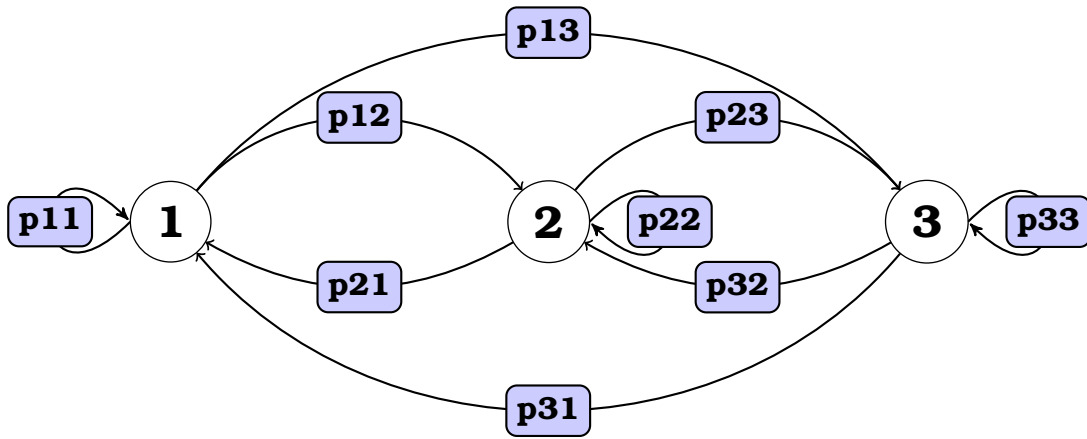


Figura 7 – Representação gráfica de uma cadeia de Markov.

2.3.4 Cadeias de Markov com tempo discreto - CMTD

Uma cadeia de Markov com N pontos acessíveis possui chances para o trânsito de um lugar a outro. p_{ij} é a probabilidade condicional de transição do estado i para o j , no intervalo de tempo seguinte. Essa probabilidade é uma função:

$$p_{ij} = P\{X(t+1) = j | X(t) = i, X(t-1) = s_{t-1}, \dots, X(1) = s_1, X(0) = k_0\}$$

$$p_{ij} = P\{X(t+1) = j | X(t) = i\} \forall t = 0, 1, 2, \dots \forall i, j, k_0, k_1, \dots, k_{t-1} \in \varepsilon \quad (2.25)$$

Para particularizar uma cadeia de Markov é necessário conhecer os estados $\varepsilon = 1, 2, \dots, s$ e a probabilidade de transição entre os estados para um dado período. Pode-se fazer isso graficamente, com um diagrama de transições ou de maneira matricial, com uma matriz quadrada com as probabilidades de transição em um período. Em geral, a segunda alternativa é mais interessante devido a possibilitar, de maneira mais simples, operações. Embora a primeira tenha grande vantagem ilustrativa. Veja exemplos delas na figura 7 e na equação (2.26):

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

No diagrama de transições cada vértice representa um estado, e cada aresta tem um coeficiente que dá a probabilidade de transição dos nós ligados por tal arco. Essas podem ter um sentido, indicado por uma flecha no arco, ou ser uma ligação em que vale a ida e a volta, sem flechas. Já na matriz P tem-se as probabilidades de transição entre os estados. Pode-se definir essa probabilidade após n períodos como:

$$p_{ij}^{(n)}(x) = P\{X(t+n) = j | X(t) = i\} = P\{X(n) = j | X(0) = i\}, \forall t = 0, 1, 2, \dots \forall i, j \in \varepsilon \quad (2.27)$$

Essa é a probabilidade de haver uma transição de i para j num tempo n . Ela pode ser obtida somando-se as probabilidades de todos caminhos que de i levam a j . Uma maneira mais simples e equivalente é determinar o elemento (i, j) da matriz $P^{(n)}$.

Uma das características de cadeias de Markov é que os elementos da matriz de transição obedecem as equações de Chapman–Kolmogorov, ela relaciona a distribuição de probabilidade conjunta de diferentes conjuntos de coordenadas de um processo estocástico(24).

$$p_{ij}^{(t+m)} = \sum_k p_{ik}^{(t)} p_{kj}^{(m)} \quad (2.28)$$

Onde t e m são dois períodos de tempo consecutivos. Se a cadeia de Markov considerada for homogênea, ou seja, com taxas de transição que não dependem do tempo, então, a equação (2.28) pode ser reescrita como um produto de matrizes:

$$P(t+m) = P(t)P(m) \implies P(t) = P^t \quad (2.29)$$

Como a matriz P é estocástica, temos que $P^{(n)} = [p_{ij}^{(n)}]$, sendo $p_{ij}^{(n)} \geq 0$ e $\sum_j p_{ij}^{(n)} = 1$.

2.3.5 Teorema I

Seja uma cadeia de Markov com arranjo inicial $\pi^{(0)}$ e matriz de transição T . A distribuição da cadeia de Markov a qualquer tempo n é dada por:

$$\pi^{(n)} = T^n \pi^{(0)} \quad (2.30)$$

Há cadeias de Markov que são regulares, ou seja, suas distribuições não mudam após um certo período de tempo. Essa distribuição para qual a cadeia tende após certo tempo é chamada distribuição de equilíbrio.

Diz-se que uma matriz de transição P é regular se alguma potência dela tem apenas entradas positivas, é importante ressaltar que se uma matriz de transição não tem entradas nulas, ela é regular.

2.3.6 Teorema II

Se uma matriz de transição T , que representa uma cadeia de Markov, é regular. Seja $\pi^{(n)}$ a distribuição após n unidades de tempo, então existe um único vetor V para o qual π tende:

$$VT = V, n \text{ muito grande} \quad (2.31)$$

Considere um vetor $w = w_1, \dots, w_N$, ele é um vetor probabilístico se todas as suas entradas são não negativas. Este é um conceito útil para o próximo teorema.

2.3.7 Teorema III

Seja a matriz de transição de uma cadeia de Markov regular T , e V o vetor da distribuição estacionária. Este obedece a restrição, e é único:

$$VT = V \quad (2.32)$$

Esses são alguns teoremas úteis para este trabalho, e não cabe aqui demonstrá-los.

2.3.8 Cadeias de Markov com tempo contínuo - CMTC

A principal diferença entre CMTD e CMTC é que na última o parâmetro da variável estocástica considerada é contínuo, por consequência, as transições entre os estados podem ocorrer a qualquer momento dentro do período de tempo em que é analisada. Por questão de interesse, as cadeias estudadas aqui são de espaço de estados discreto e as probabilidades de transição não dependem do tempo de permanência em dado estado. De forma que:

$$p_{ij}(t) = P\{X(t+m) = j | X(s) = i\} = P\{X(t) = j | X(0) = i\}, \forall s \geq 0 \forall i, j \in \varepsilon \quad (2.33)$$

Para representar completamente uma cadeia de Markov de tempo contínuo, pode-se usar um grafo ou uma matriz quadrada. Da mesma maneira que foi exposto para CMTD, a representação gráfica é um grafo, onde cada vértice é um estado, e as arestas orientadas são as transições entre os estados e os coeficientes delas são as taxas de transição.

Na matriz, cada linha/coluna é um estado e os elementos são as taxas de transição, onde os índices de linha e coluna indicam entre quais estados está associada a taxa. Serão consideradas CMTC homogêneas, ou seja, que não dependem da sequência de estados nem do intervalo considerado, apenas do tamanho dele.

O tempo de permanência em um dado estado passa a ter importância quando trata-se de CMTC. A expressão abaixo indica isto:

$$X(t_n) = j_n \quad \text{dado que } X(t_i) = i \quad t_i \in [t_m, t_n). \quad (2.34)$$

O tempo de permanência no estado i é $t_n - t_m$, em que t_m é o primeiro instante, deste intervalo, em que $X(t) = i$. Como consequência da propriedade markoviana, o sistema ter permanecido em um estado por algum tempo não influencia na probabilidade de deixá-lo no próximo instante. A única função contínua que obedece essa propriedade é a exponencial(25), então o tempo de permanência tem este tipo de distribuição.

Associado ao tempo de permanência, tem-se uma taxa de transição μ_i , ela é o número de vezes que a grandeza em questão sai do estado i dividido

pelo tempo que ficou em i . Então $\mu_i = \frac{1}{\tau_i}$, onde τ_i é o tempo de permanência no estado i . A taxa de transição de um estado i para j , μ_{ij} é o número de vezes que o processo faz uma transição de i para j dividida pelo tempo de permanência em i .

O coeficiente associado a cada transição foi chamado anteriormente como p_{ij} , relacionando-se ele com a taxa de transição definida acima, temos:

$$\mu_{ij} = \mu_i p_{ij} \quad \text{Para } i \neq j \quad (2.35)$$

É fácil ver que, a taxa de permanência num dado estado, é a soma das taxas de transição aos outros, assim:

$$\sum_{j \neq i} \mu_{ij} = \mu_i \sum_{i \neq j} p_{ij} = \mu_i \quad (2.36)$$

2.3.8.1 CTRW: caminhadas aleatórias de tempo contínuo

É possível escrever o passeio aleatório utilizando-se de cadeias de Markov. Como exemplo, suponha o grafo na figura 6, com taxa de transição entre γ em todas as ligações. Em um intervalo de tempo infinitesimal δt a probabilidade de sair de um nó i para um j é proporcional a $\gamma \delta t$ com $\delta t \rightarrow 0$ (para o caso contínuo).

O número de ligações do nó de saída é chamado grau k_i do nó i . Ele afeta as possibilidades de sair do vértice em que se encontra, de forma proporcional também (8). Então, a probabilidade de permanecer em um dado nó é $1 - k_i \gamma \delta t$. A matriz de transição dessa cadeia é:

$$M_{ij} = \begin{cases} 1 - k_i \gamma \delta t & i = j \\ k_i \gamma \delta t & i \neq j \end{cases} \quad (2.37)$$

Aqui será definida a matriz de conectividade A . Ela tem relação com a matriz de transição mencionada e uma construção semelhante a da matriz

laplaciano:

$$A_{ij} = \left\{ \begin{array}{ll} -1, & i \neq j \text{ há ligação entre } i \text{ e } j \\ 0, & i \neq j \text{ não há ligação entre } i \text{ e } j \\ k_i, & \text{se } i = j \end{array} \right\} \quad (2.38)$$

O espaço em que será trabalhado é o de Hilbert N-dimensional, o qual tem uma base ortonormal, que será construída com os autovetores do hamiltoniano do sistema. Pelo método, será considerada a hipótese que o hamiltoniano é proporcional a matriz de conectividade $\mathbf{H} \equiv -\gamma\mathbf{A}$. E por simplicidade $\gamma \equiv 1$.

Para encontrar uma expressão que descreva a dinâmica de passeios aleatórios em grafos com tempo contínuo, note que a variação no tempo da equação (2.37), num tempo infinitesimal δt :

$$M_{ij}(t + \delta t) = \sum_k M_{jk}(\delta t) M_{ki}(t) \quad (2.39)$$

Que organizando, usando as equações (2.37) e (2.38):

$$M_{ij}(t + \delta t) = M_{ji}(t) M_{jj}(\delta t) + \sum_{k \neq j} \gamma \delta t k_i M_{ki}(t)$$

$$M_{ij}(t + \delta t) = M_{ji}(t) [1 - k_i \delta t] + \delta t \sum_{k \neq j} k_i \gamma M_{ki}(t)$$

Como $\mathbf{M} = -\gamma\mathbf{A} = \mathbf{H} = -\mathbf{T}$, onde \mathbf{T} é chamada matriz de transferência, tem-se:

$$M_{ij}(t + \delta t) = M_{ji}(t) - \delta t M_{ji}(t) H_{jj} - \delta t \sum_{k \neq j} M_{ki}(t) H_{jk}$$

$$M_{ij}(t + \delta t) - M_{ji}(t) = -\delta t M_{ji}(t) H_{jj} - \delta t \sum_{k \neq j} M_{ki}(t) H_{jk}$$

$$\frac{M_{ij}(t + \delta t) - M_{ji}(t)}{\delta t} = -M_{ji}(t) H_{jj} - \sum_{k \neq j} M_{ki}(t) H_{jk}$$

No limite de $\delta t \rightarrow 0$,

$$\frac{dM_{ji}(t)}{dt} = - \sum_{k \neq j} M_{ki}(t) H_{jk} \quad (2.40)$$

A equação (2.40) descreve a dinâmica da probabilidade clássica de transição do nó i para o j , apenas para a notação concordar com a comumente utilizada:

$$\frac{dp_{ij}(t)}{dt} = - \sum_k T_{jk} p_{ki}(t) \quad (2.41)$$

Onde $M_{ki}(t) = p_{ki}(t)$, $H_{jk} = T_{jk}$ e $p_{ij}(t)$ é a probabilidade clássica de transição partindo de i para j .

A forma da equação (2.41) foi encontrada em outros momentos nesse trabalho, e uma solução que tem sido utilizada é a exponencial, reescrevendo a expressão em termos de vetores e considerando uma base ortonormal no espaço de Hilbert N -dimensional para a matriz T , supondo $|i\rangle$ os autoestados, depois de alguma álgebra, a probabilidade clássica de transição fica:

$$p_{ij} = \langle i | e^{Tt} | j \rangle = \sum_n e^{-\lambda_n t} \langle i | q_n \rangle \langle q_n | j \rangle \quad (2.42)$$

Onde, por simplicidade foi utilizado $\gamma = 1$. E λ_n são os autovalores da matriz de conectividade e $|q_n\rangle$ os autovetores. De forma que n é o número de elementos (vetores) nessa base; $|i\rangle$ e $|j\rangle$ são os estados de partida e chegada, respectivamente.

2.4 Mecânica quântica

No final do século XIX, a sociedade científica estava otimista quanto a ter modelos adequados, ou seja que descrevem a realidade de maneira muito próximo a mesma, para quase todos os fenômenos físicos conhecidos. Embora, alguns problemas específicos não se enquadravam em qualquer explicação proposta.

A tentativa de solucionar, então, esclarecer baseado em teorias físicas, estes problemas, marca o início da física moderna. Espectro de radiação de corpos negros, dualidade onda-partícula, estabilidade do átomo e espectros

emitidos ou absorvidos por átomos são alguns exemplos de fenômenos que não eram explicados pelo que hoje chama-se física clássica.

A pesquisa na primeira metade do século XX estabeleceu os alicerces da mecânica quântica e a relatividade geral. Aquela estabelece o comportamento atômico e subatômico, enquanto esta explica como comportam-se partículas em altas velocidades, ou seja relevantes em relação a da luz.

2.4.1 Postulados da mecânica quântica

No seu livro "Quantum walks and search algorithms", Renato Portugal(8) compara os postulados da mecânica quântica com "as regras do jogo", em analogia a um jogo de xadrez. Ele quer com isso, abordar os postulados de maneira mais direta para as aplicações que ele propõe: caminhadas e algoritmos de busca. Esta seção do trabalho é baseada nesta ideia e livro.

2.4.1.1 Espaço de estados

O estado de um sistema físico descreve-o num dado tempo. Então o espaço de estados é o conjunto de todos os estados que o sistema pode assumir. Um exemplo simples é a posição do bêbado na situação abordada anteriormente, o espaço de estados da posição é basicamente o conjunto dos valores que $x(t)$ pode assumir.

1º Postulado: Todo sistema físico isolado tem a ele associado um espaço de Hilbert, chamado espaço de estados. Um estado deste sistema é completamente descrito por um vetor unitário nesse espaço de estados, definido como vetor de estado no espaço de Hilbert.

Note que, uma característica de espaços vetoriais é que cada vetor pode ser escrito como uma combinação linear da base. Em outras palavras, um

estado pode ser visto como uma superposição de estados, isto é:

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\varphi_n\rangle \quad (2.43)$$

Onde C_n são amplitudes, φ_n são estados que geram o espaço de estados ε . E, este tipo de espaço tem as propriedades de, ortogonalidade:

$$\langle \varphi_n | \varphi_l \rangle = \delta_{nl} \quad (2.44)$$

e completeza:

$$\sum_{n=1}^N |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = 1 \quad (2.45)$$

Desta forma, um estado é simultaneamente a soma de outros estados. Porém, isso ocorre quando o sistema está isolado, ou seja, não interage com o ambiente. Teoricamente, não há restrição para o tamanho, porém é mais fácil isolar sistemas com poucos elementos. Além disso, na prática, o que tem-se são sistemas aproximadamente isolados, de maneira que o postulado é uma idealização.

2.4.1.2 O processo de medida

Quando ocorre a medida de uma grandeza física tem-se a obtenção do observável. Na mecânica quântica substitui-se as variáveis dinâmicas por objetos abstratos chamados operadores.

2º Postulado: Cada observável físico tem associado um operador linear auto-adjunto \hat{A} que atua em ε .

Este postulado garante que os observáveis possuam valores reais.

3º Postulado: Os possíveis valores de medida do observável \hat{A} são elementos de seu espectro (e o espectro trivial é o de autovalores).

Para obter os autovalores é necessário solucionar a equação de autovalor:

$$\hat{A} |v_\lambda\rangle = a_\lambda |v_\lambda\rangle \quad (2.46)$$

Onde $|v_\lambda\rangle$ é autovetor e a_λ é autovalor do operador. A existência desses autovalores é garantida pelo teorema espectral.

Dentro do espectro de medidas do observável \hat{A} , a_λ , cada possível valor tem sua probabilidade $P(a_\lambda)$.

4º Postulado: Ao medir um observável \hat{A} , de um sistema físico no estado normalizado $|\psi\rangle$, a probabilidade $P(a_\lambda)$ de obter o valor a_λ , é:

$$P(a_\lambda) \equiv |\langle \varphi_\lambda | \psi \rangle|^2. \quad (2.47)$$

Onde φ_λ é autovetor normalizado do observável \hat{A} , com autovalor a_λ .

O valor médio de uma operador é, portanto, uma informação relevante nesses sistemas. Pois entre os possíveis valores para o observável ele dá o mais provável.

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (2.48)$$

Com desvio padrão de:

$$\Delta \hat{A} = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2} \quad (2.49)$$

2.4.1.3 Evolução temporal

Em um sistema quântico isolado a evolução temporal é dada por uma transformação unitária \hat{U} . Esta preserva norma, e se em t_1 o estado é $|\psi_1\rangle$, então em t_2 o sistema estará no estado $|\psi_2\rangle$. Então:

$$|\psi_2\rangle = \hat{U} |\psi_1\rangle \quad (2.50)$$

No contexto de computação quântica é interessante o postulado de evolução temporal ser escrito desta forma, pois permite que o programador possa utilizar a transformação unitária que quiser para manipular o estado quântico. E essa manipulação do operador unitário, junto, a cada estado ser uma superposição de outros estados, fazem algoritmos quânticos terem vantagem na realização de algumas tarefas em relação ao clássico, como

exemplo tem-se os algoritmos de fatoração de Peter Shor(4) e o de busca de Grover(26). Outra forma deste postulado é escrever em termos da equação de Schrödinger. Ela dá a dinâmica em sistemas físicos.

5ºPostulado: A evolução temporal do estado $|\psi(t)\rangle$ é determinada através da equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (2.51)$$

Onde $\hat{H}(t)$ é o observável associado a energia total do sistema, hamiltoniano.

2.4.1.4 Composição de sistemas

Na composição de sistemas, o espaço de estados resultante é o produto tensorial dos espaços de estado componentes.

Como exemplo, o spin do elétron pode ser representado por um vetor no espaço de Hilbert C^2 . Os valores que ele pode assumir são spin up e spin down:

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.52)$$

$$|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.53)$$

Se invés de um spin, considerarmos dois como um sistema, o espaço de estados aqui pode ser $\varepsilon = |0, 0\rangle, |0, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, 1\rangle = C^4$. Como exemplo de um estado:

$$|0, 1\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.54)$$

2.5 Caminhadas quânticas

Nas seções anteriores, de maneira prática foi apresentado um modelo para caminhadas aleatórias, características de cadeias de Markov e noções de como objetos quânticos são tratados. Nesta etapa, será abordado um modelo

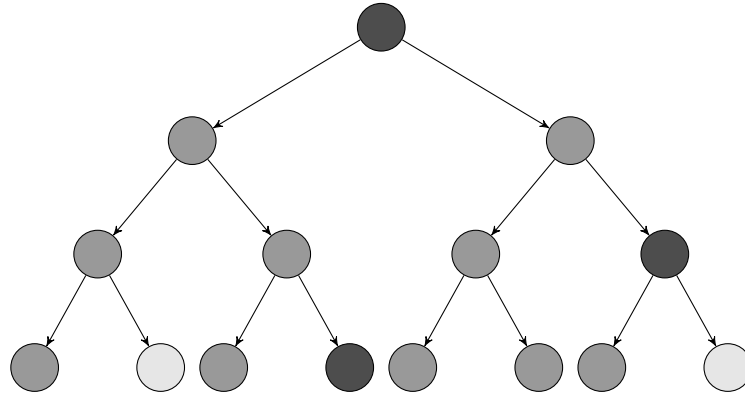


Figura 8 – Representação de caminhada quântica.

de caminhada quântica, também chamada "*continuous time quantum walk* (CTQW)", sua diferença essencial é que o caminhante é um objeto quântico. E o espaço de posições é discreto (redes ou grafos).

Há duas classes desse tipo de problema, as caminhadas de tempo discreto e contínuo. Elas são tratadas de maneiras um tanto distintas. Mas, em comum, tem-se que o caminhante é suscetível a propriedade de superposição. Ou seja, ele não anda para esquerda ou direita, sua posição é descrita por uma função de onda que tem alguma amplitude para esquerda e outra para direita, isto no caso unidimensional. A figura 8 ilustra essa situação, onde quanto mais escuro, maior a probabilidade e mais claro menor.

2.5.1 Modelo de tempo discreto

O artigo que deu origem as investigações sobre caminhadas quânticas foi intitulado "Quantum random walks", e escrito por Aharonov, Yakir, Davidovich, Luiz, Zagury e Nizim (27). Ele buscou em comparação as caminhadas aleatórias clássicas construir um modelo para caminhantes quânticos.

Para tanto, foi proposto um espaço de estados que é produto tensorial entre espaço de estados da posição e moeda. Este está relacionado à aleatoriedade do movimento, em analogia ao clássico, é o "sorteio" que decide para que lado o caminhante deve seguir. Aquele relaciona cada sítio da rede como uma posição, e as arestas são ligações entre os sítios ou nós.

Cada nó da rede possui um vetor posição associado. O espaço de moeda pode ser visto como o espaço de estados de spin $1/2$. Portanto o spin up ou down relacionam-se com o sentido da caminhada. A evolução temporal ocorre em intervalos de tempo discreto τ , e o operador unitário abaixo descreve a mesma:

$$\hat{U} = \hat{R}\hat{M} \quad (2.55)$$

Onde \hat{U} , \hat{R} e \hat{M} são operadores evolução temporal, translação condicional e moeda. Os dois últimos com definição, segundo Venancio(28):

$$\hat{R} = \exp \left[-i\hat{\sigma}_z \otimes \hat{P} \frac{l}{\hbar} \right] \quad (2.56)$$

$$\hat{M} = \exp \left[\frac{i\pi\hat{\sigma}_y}{4} \otimes \hat{\mathbf{1}}_x \right] \quad (2.57)$$

Onde $\hat{\sigma}_z$ e $\hat{\sigma}_y$ são as matrizes de Pauli, l é o comprimento da aresta (passo), \hat{P} é o operador momento no espaço das posições, $\hat{\mathbf{1}}_x$ é a relação de completude no espaço das posições.

A ação do operador \hat{R} depende do autovalor de $\hat{\sigma}_z$, por isso ele é chamado operador de translação condicional. É importante lembrar que:

$$\hat{\sigma}_z |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle \quad (2.58)$$

Ou seja, o operador \hat{R} translada a posição x em $x \pm l$. Já \hat{M} pode ser substituído por qualquer operador unitário, ele atua nos graus de liberdade interno do sistema, o análogo a moeda do caso clássico. No entanto, devido a propriedade de superposição, não há deslocamento apenas para um dos lados, e sim em ambos, com amplitudes diferentes, o operador moeda dita como isto ocorre.

2.5.2 Modelo de tempo contínuo

Em 1998 foi proposto por Farhi e Gutmann(29) caminhadas quânticas de tempo contínuo (CTQW), eles modelaram o transporte quântico em grafos de forma análoga ao tratamento de cadeias de markov de tempo contínuo em caminhadas clássicas. Nessa abordagem, uma cadeia de N vértices relaciona-se a uma matriz $N \times N$ chamada matriz de transição M . Cujos elementos são:

$$m_{ij} = \left\{ \begin{array}{ll} -\gamma_{ij} & \text{para } i \neq j \text{ e conectados} \\ 0, & \text{para } i \neq j \text{ e não conectados} \\ s_i, & \text{para } i = j \end{array} \right\} \quad (2.59)$$

Onde γ_{ij} é a probabilidade de transição por unidade de tempo do estado i para j . E s_i é o análogo a μ_i do caso CMTC, ou seja, taxa relacionada a permanência em determinado nó.

Particularizando para o caso em que $\gamma_{ij} = \gamma$, a matriz de transição pode ser escrita como:

$$M = \gamma L \quad (2.60)$$

Onde L é a matriz laplaciano da cadeia.

A dinâmica da grandeza na cadeia ocorre com a utilização do operador evolução temporal, como apresentado na equação (2.51), definindo $\hbar \equiv 1$, tem-se:

$$i \frac{d}{dt} |k\rangle = H |k\rangle \quad (2.61)$$

Onde H é o hamiltoniano, que por hipótese é proporcional a matriz laplaciano associada à cadeia $H \equiv \gamma L$. A matriz laplaciano é real e simétrica, portanto hermitiana. E $|k\rangle$ são vetores ortonormais que geram o espaço de hilbert associado ao sistema.

Esses vetores $|k\rangle$ representam estados no espaço de Hilbert para o sistema, e por representarem estados ortonormais, são ortogonais entre si $\langle j|k\rangle = \delta_{jk}$ e têm relação de completeza $\sum_k |k\rangle \langle k| = 1$. De maneira que, a

amplitude de transição $\alpha_{jk}(t) \equiv \langle j|k \rangle$ pode ser determinada aplicando o bra $\langle j|$ na equação (2.61):

$$i \frac{d}{dt} \langle j|k \rangle = \langle j| H |k \rangle \quad (2.62)$$

$$\frac{d}{dt} \alpha_{jk}(t) = -i \sum_l^N H_{jl} \alpha_{lk}(t) \quad (2.63)$$

Esta expressão é parecida com a obtida para a propagação de uma referência a equação (2.17). Por conseguinte, a solução será semelhante:

$$\alpha_{jk}(t) = \langle j|e^{-iHt}|k \rangle \quad (2.64)$$

E com esta função define-se a probabilidade quântica de transição entre os estados j e k :

$$\pi_{jk} \equiv |\alpha_{jk}(t)|^2 = \left| \sum_n e^{-itE_n} \langle j|q_n \rangle \langle q_n|k \rangle \right|^2 \quad (2.65)$$

Onde $|q_n\rangle$ são autovetores do hamiltoniano e E_n autovalores. Para mais detalhes sobre este tratamento dado ao transporte quântico em grafos consulte Volta, Mülken e Blumen(30).

2.6 Eficiência das CTRW e CTQW

Uma rede é considerada eficiente quando a grandeza (caminhante) se espalha rapidamente pelos vértices. Para medir a eficiência há diversas técnicas aproximativas como a de medir a desidade de estados, medir a degenerescência de autovalores, determinar o número de Poylá, entre outros (31).

Neste trabalho, para medir a eficiência das redes será calculada a média das probabilidades de retorno para cada nó da rede, tanto no caso clássico quanto no quântico. As equações (2.42) e (2.65) dão as probabilidades de transição de um nó i para um j nos casos clássico e quântico, respectivamente. Assim para calcular a média das probabilidades de retorno será considerado

$p_{ii}(t)$ e $\pi_{ii}(t)$:

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N p_{kk}(t) \quad (2.66)$$

$$\bar{\pi}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \pi_{kk}(t) \quad (2.67)$$

Para o caso clássico, a equação (2.66), após algumas manipulações, fica:

$$\bar{p}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{-\lambda_n t} \quad (2.68)$$

Onde λ_n são os autovalores da matriz de conectividade. Já para o caso quântico, $\bar{\pi}(t)$ não diminui para um determinado valor, mas sim oscila em torno da média de longo tempo (9):

$$\bar{\chi} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \bar{\pi}(t') dt' \quad (2.69)$$

Que substituindo a equação (2.67) e organizando, tem-se:

$$\bar{\chi} = \frac{1}{N} \sum_{n,m} \delta_{\lambda_n, \lambda_m} |\langle k|q_n\rangle|^2 |\langle k|q_m\rangle|^2 \quad (2.70)$$

3 Metodologia

Neste trabalho propões-se o estudo da probabilidade de transição entre estados(em específico a probabilidade de retorno) e a determinação da eficiência em redes do tipo anel. Essas redes são bidimensionais, onde cada nó está conectado com outros dois mais próximos, como a figura 9 exemplifica.

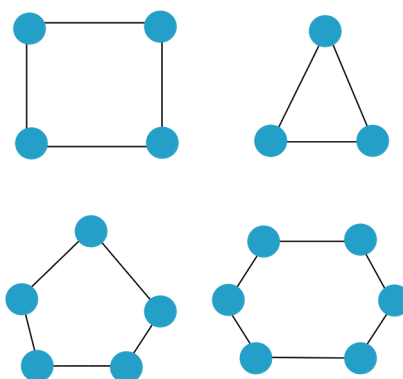


Figura 9 – Exemplos de redes fechadas bidimensionais.

Conhecendo a rede a ser estudada, é associado a ela a matriz de conectividade, e com a mesma, basta encontrar os autovalores e autovetores (ortonormalizados) e determinar os parâmetros através das equações (2.42), para probabilidade de retorno clássica, (2.65) quântica e a ineficiência da rede pela (2.70). Um exemplo dessa abordagem para rede triangular encontra-se no apêndice A.

Além disso, um programa que segue esses procedimentos foi construído utilizando a linguagem de programação Python. Dele, gráficos que ilustram os resultados obtidos foram construídos e na seção resultados serão apresentados. Esse programa encontra-se no apêndice D.

4 Resultados

Neste capítulo serão mostrados os resultados obtidos na análise do transporte quântico em tempo contínuo nas redes do tipo anel. O método utilizado é o apresentado no capítulo 2, seção: CTQW.

Para exibir uma comparação entre o comportamento clássico e quântico, também foi utilizado o método apresentado na seção de cadeias de Markov em tempo contínuo para descrever a caminhada aleatória clássica, para o mesmo tipo de rede. Por fim, a ineficiência de redes anéis clássicas e quânticas será exibida, pelos modelos CTRW e CTQW, já apresentados.

Como trata-se de redes muito simétricas, a probabilidade de transição que foi escolhida investigar é a de iniciar-se em um ponto i e depois de um certo tempo t encontrar-se no mesmo ponto i , ou seja, probabilidade de retorno. Essa medida para uma rede do tipo anel dá ideia de quão bem uma perturbação espalha-se, por cada nó.

4.1 Rede triangular: comparação entre resultados analíticos e numéricos

Para resolver as equações que permitem determinar $p_{ii}(t)$ e $\pi_{ii}(t)$ é necessário trabalhar com matrizes da ordem $N \times N$, onde N é o número de vértices do grafo. Assim, para que seja simples o tratamento analítico foi escolhido uma rede de $N = 3$, do tipo anel. A descrição desse desenvolvimento encontra-se no apêndice A.

A expressão encontrada que representa esta probabilidade no decorrer do tempo foi:

$$p_{11}(t) = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}e^{-3t} \quad (4.1)$$

$$\pi_{11}(t) = \frac{1}{9}(5 + 4\cos 3t) \quad (4.2)$$

Para ineficiência, em longo tempo, a clássica é simplesmente $1/N$, neste caso $1/3$. A quântica foi de:

$$\bar{\chi} = \frac{20}{108} \approx 0,18. \quad (4.3)$$

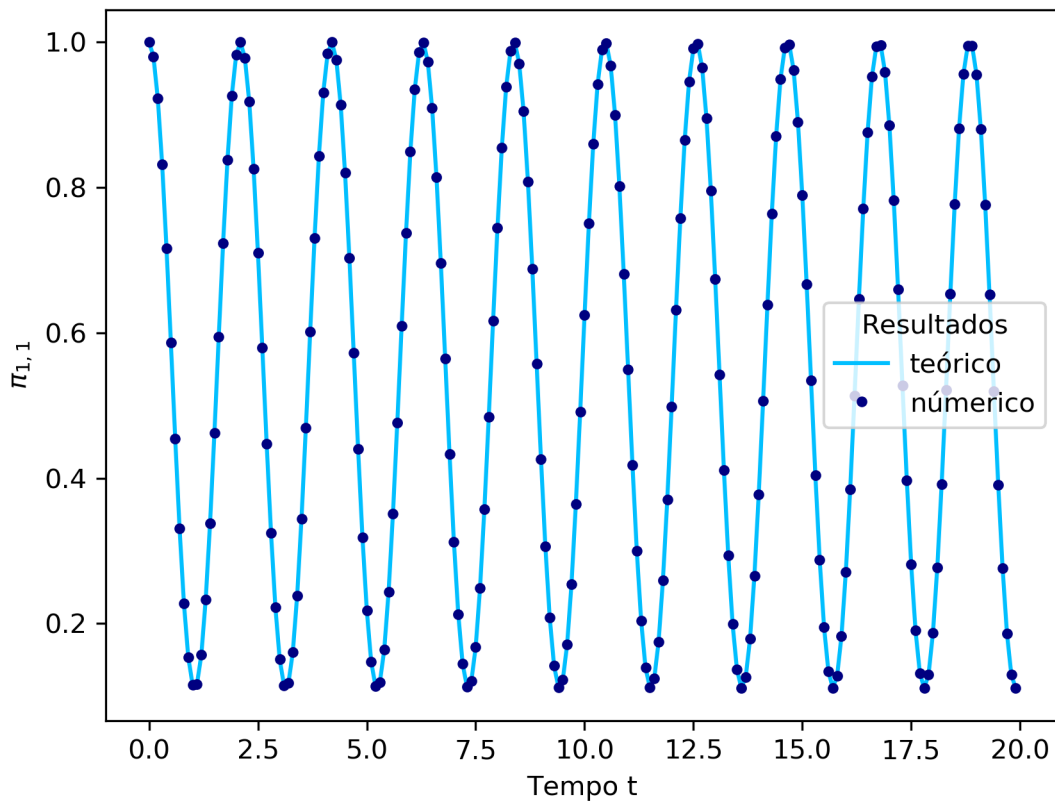


Figura 10 – Probabilidade quântica de retorno na rede triangular.

O gráfico na figura 10 compara a expressão na equação (4.2) classificada como resultado analítico e a expressão geral, na equação (2.65) aplicada a este caso, $N = 3$. Como esperado, os dois resultados são equivalentes. É notável que esta probabilidade de transição não aparente tender para um valor específico, como a clássica, e além disso apresenta uma amplitude de oscilação muito ampla, onde em vários momentos chega a 0 ou 1.

Essas características estão relacionadas ao fato do vetor de estado do caminhante, com a aplicação do operador evolução temporal, mudar as amplitudes dos estados base. Tais estados representam os vértices do grafo.

4.2 Probabilidades de transição quânticas: Probabilidade de retorno

A probabilidade quântica de estar no estado inicial após um tempo t é descrita através da figura 11 para redes do tipo anel com diferentes números de vértices. Observe que quanto menor a rede, a amplitude de oscilação é mais acentuada. O caminhante tem uma probabilidade maior de estar localizado num dos nós. Em redes muito grandes ($N = 100$) tem-se mais chances de ter ocorrido transição para algum outro nó. Ou seja, $\pi_{11}(t)$ diminuir com o tempo para anéis longos significa maior espalhamento na rede. Isso é também facilitado pela geometria considerada; os segmentos lineares favorecem o espalhamento enquanto as redes tipo estrela ou árvores mostram uma drástica diminuição no espalhamento (21, 32). Observa-se que para redes maiores ($N = 100$) um comportamento diferenciado das redes lineares: a região entre $t = 10^0$ e $t \approx 4 \cdot 10^1$ apresenta um comportamento de redes lineares e para tempos maiores a interferência das ondas é predominante, sendo influenciada pelo anel.

Na figura 12 é exibida a probabilidade clássica média obtida pelo tratamento CTRW, para as mesmas redes anéis nas quais fez-se o tratamento CTQW mostrado na figura 11. É fácil de observar a nítida diferença entre os casos em que, em caminhadas clássicas, a longo tempo, a probabilidade de retorno tende a $1/N$, ou seja, exibe um comportamento constante, na quântica essa probabilidade exibe características oscilatórias. Esse é um resultado geral, encontrado para qualquer rede (33), e varia somente o tempo quando encontra-se essa probabilidade de equilíbrio.

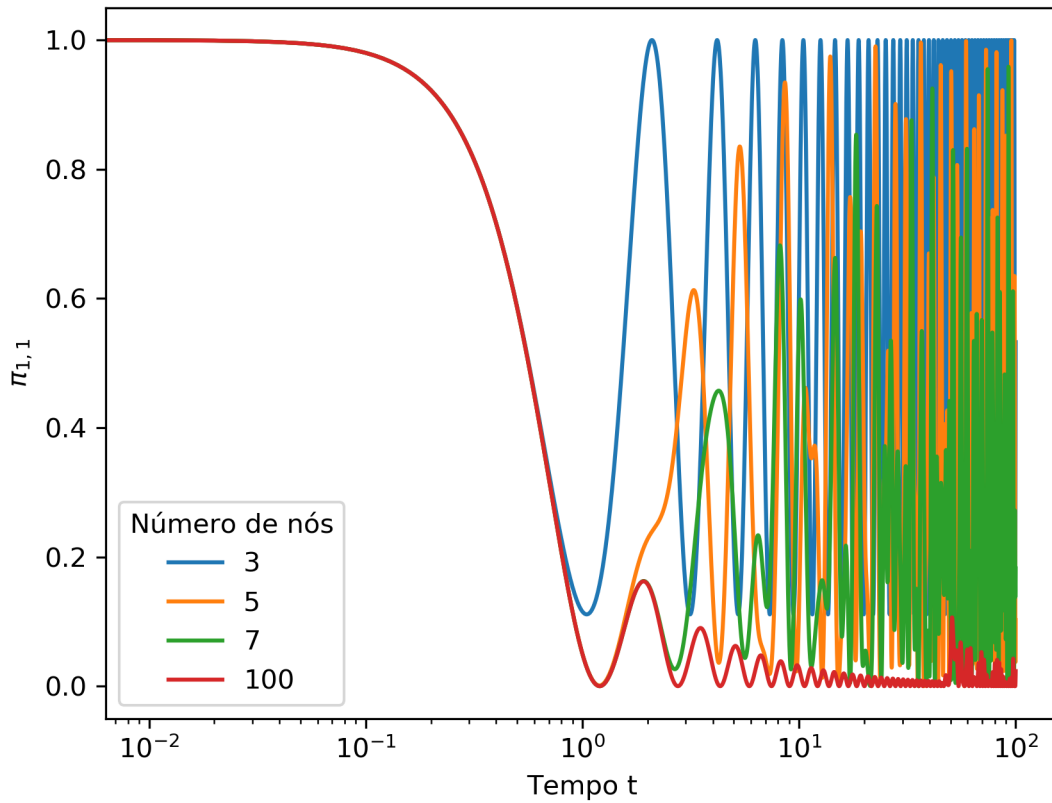


Figura 11 – Probabilidade quântica de retorno.

4.3 Eficiência do transporte

A medida da eficiência de caminhadas clássicas e quânticas foi descrita no referencial teórico, e as expressões encontradas são $1/N$ e a equação (2.70), respectivamente. A eficiência do transporte é maior quando $\bar{\chi}$ é menor. A eficiência máxima é encontrada quando $\bar{\chi} = 0$.

Na figura 13 foi plotada a eficiência clássica e quântica para redes fechadas de 3 a 100 nós, resultados obtidos numericamente. Note que os pontos referentes a caminhadas quânticas decaem mais rapidamente. Isso significa que caminhantes quânticos espalham-se mais rápido em redes do tipo anel. Observa-se que no transporte quântico o valor de equilíbrio é atingido para redes menores. Devido aos efeitos de localização, ou seja uma diminuição da interferência de ondas, as redes menores tem uma eficiência menor.

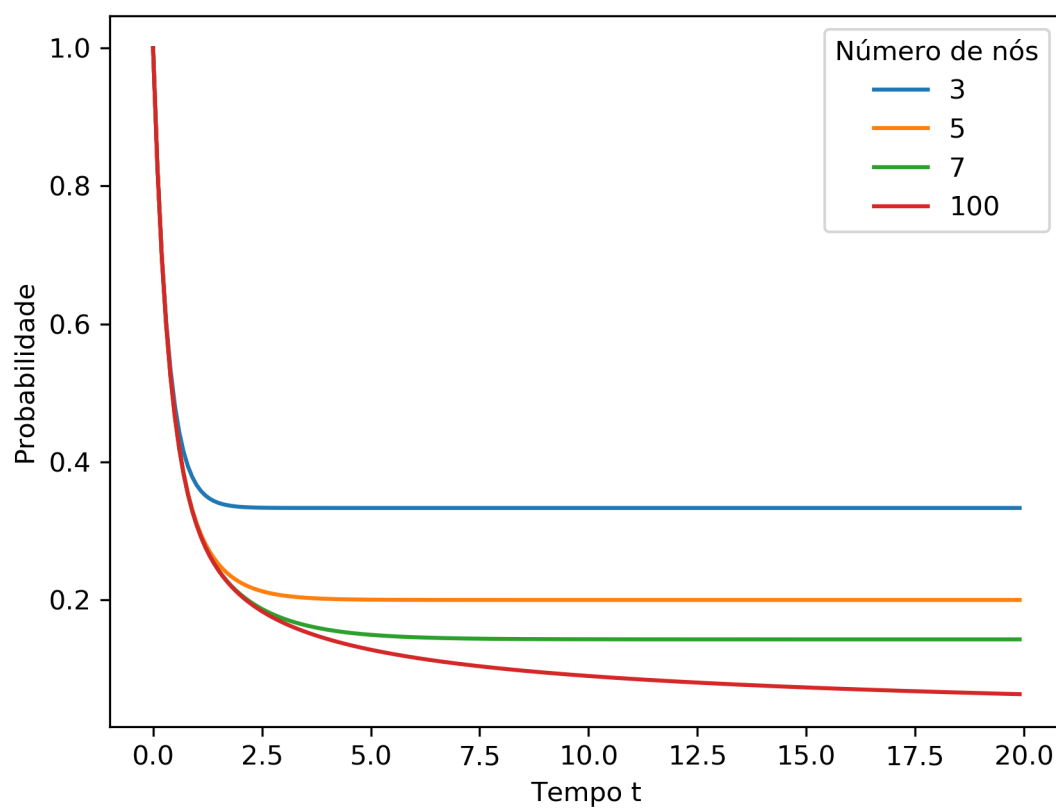


Figura 12 – Probabilidade clássica de retorno.

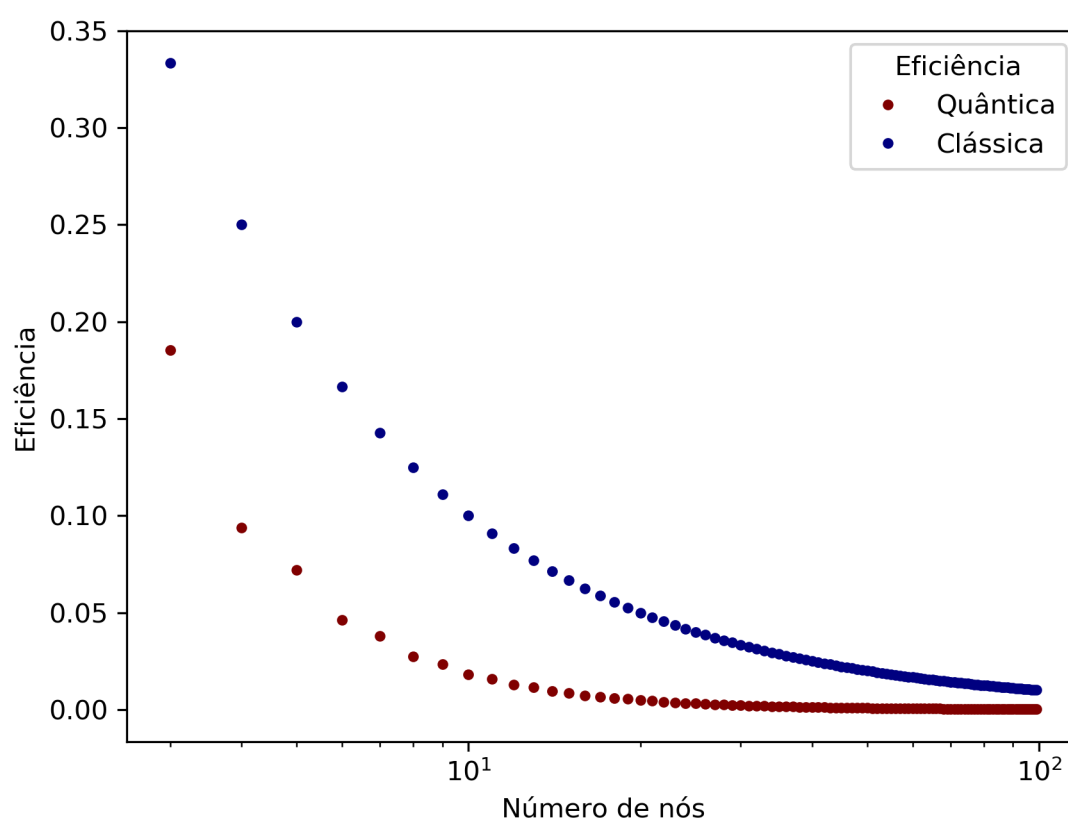


Figura 13 – Comparação entre a eficiência do transporte clássico e quântico.

5 Considerações finais

Este trabalho apresentou ferramentas teóricas utilizadas para o estudo de caminhadas quânticas em redes fechadas com tempo contínuo. O caminhante quântico é a função de onda, para uma partícula que encontra-se dentro dos limites em que há coerência quântica. A abordagem dada a este fenômeno foi a descrita por Farhi e Gutmann(29) e atualmente conhecida CTQW.

Neste tratamento, o espaço de estados do sistema é o espaço de Hilbert com dimensão N , onde N é o número de vértices que tem a cadeia na qual ocorre o passeio aleatório. Cada vértice da rede é associado a um vetor da base ortonormal construída dos autovetores da matriz laplaciano relacionada a rede.

A dinâmica ocorre através da aplicação do operador evolução temporal sob o hamiltoniano do sistema, no entanto, este é substituído pela matriz de conectividade. A localização do caminhante na rede é analisada pelas taxas de transição da probabilidade dele estar em determinado nó.

Essa forma de estudar as caminhadas quânticas foi baseada nas cadeias de Markov de tempo contínuo. O passeio aleatório pode ser modelado neste tipo de cadeia, como mostrado no trabalho de Barkai(34).

Para investigar o transporte em redes do tipo anel foram utilizados as grandezas: probabilidade clássica de transição, probabilidade quântica de transição e ineficiência. Elas foram obtidas analiticamente para o caso de uma rede triangular por razões didáticas. Também foram encontradas, para diferentes tamanhos de redes circulares através de um programa em python desenvolvido, utilizando as equações apresentadas no presente trabalho. Os dados foram organizados em gráficos e apresentados na seção de resultados. O foco foi nas probabilidades de retorno (começar no estado i depois de dado tempo está em i) clássicas e quânticas adquiridas numericamente, pelo programa, e analiticamente para rede triangular. É observada a perfeita concordância entre esses resultados, isso ocorre conforme esperado, pois o método é equivalente em ambos os casos.

Por tratar-se de uma rede pequena há uma amplitude de oscilação muito grande, vai de 1 a 0 repetidas vezes, para a probabilidade de permanência. Essa característica diminui com redes maiores pois há bem mais nós em que é possível o caminhante estar, o que dificulta ter todas as chances em apenas um, no caso quântico.

As probabilidades clássicas tendem a um valor constante que é $1/N$, o que é esperado já que o caminhante clássico precisa produzir um caminho para chegar em dado vértice, como não há preferência para qualquer nó, a probabilidade de estar em algum nó é $1/N$. Já no caso quântico, o caminhante não passa por nós para chegar em algum lugar, mas as probabilidades de estar fluem pela rede, deste modo, tem-se uma probabilidade de permanência que oscila com o tempo, no entanto para redes anéis grandes esse valor fica oscilante próximo de zero, isso indica que a eficiência é maior.

A medida da eficiência de uma rede está relacionada com a média da probabilidade de permanência, como discutido no referencial teórico. Quanto menor esta média mais eficiente a rede é, pois espalha a perturbação rapidamente. Os resultados para todas as redes do tipo anel mostram que caminhantes quânticos espalham-se melhor que clássicos. Com o programa produzido é possível fazer modificações na matriz de conectividade e assim utilizá-lo para estudar redes com diferentes formas e tamanhos maiores(ou menores).

Referências

- 1 BARRETT, L.; LOWEN, C. Random walks and the gas model: spacing behaviour of grey-cheeked mangabeys. *Functional Ecology*, Wiley Online Library, v. 12, n. 6, p. 857–865, 1998. 13
- 2 FAMA, E. F. Random walks in stock market prices. *Financial analysts journal*, Taylor & Francis, v. 51, n. 1, p. 75–80, 1995. 13
- 3 FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. *International journal of theoretical physics*, Springer, v. 21, n. 6, p. 467–488, 1982. 14
- 4 SHOR, P. W. Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring. In: IEEE. *Proceedings 35th annual symposium on foundations of computer science*. [S.l.], 1994. p. 124–134. 14, 37
- 5 GROVER, L. K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. *Physical review letters*, APS, v. 79, n. 2, p. 325, 1997. 14
- 6 WATSON, T. et al. A programmable two-qubit quantum processor in silicon. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 555, n. 7698, p. 633, 2018. 14
- 7 ROY, T. et al. A programmable three-qubit superconducting processor with all-to-all connectivity. *arXiv preprint arXiv:1809.00668*, 2018. 14
- 8 PORTUGAL, R. *Quantum walks and search algorithms*. [S.l.]: Springer, 2013. 14, 31, 34
- 9 XU, X.-P. Exact analytical results for quantum walks on star graphs. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 42, n. 11, p. 115205, 2009. 14, 42
- 10 BACON, F. *Novum Organum*. [S.l.]: Acrópolis, 1620. v. 1. 16
- 11 DESCARTES, R. *Discurso do Método*. [S.l.]: Acrópolis, 1637. v. 1. 16
- 12 V.P.L.S., R. B. F. H. M. . R. A. Xxvii. a brief account of microscopical observations made in the months of june, july and august 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. *The Philosophical Magazine*, Taylor & Francis, v. 4, n. 21, p. 161–173, 1828. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/14786442808674769>>. 16, 17
- 13 Yang, X.; Suash Deb. Cuckoo search via lévy flights. In: *2009 World Congress on Nature Biologically Inspired Computing (NaBIC)*. [S.l.: s.n.], 2009. p. 210–214. 16
- 14 PERUZZO, A. et al. Quantum walks of correlated photons. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 329, n. 5998, p. 1500–1503, 2010. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/329/5998/1500>>. 16

- 15 EINSTEIN, A. Über die von der molekularkinetischen theorie der wärme geforderte bewegung von in ruhenden flüssigkeiten suspendierten teilchen. *Annalen der Physik*, v. 322, n. 8, p. 549–560, 1905. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19053220806>>. 17
- 16 KAC, M. Random walk and the theory of brownian motion. *The American Mathematical Monthly*, Taylor & Francis, v. 54, n. 7P1, p. 369–391, 1947. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/00029890.1947.11990189>>. 17
- 17 SALINAS, S. R. *Introdução à Física Estatística*. [S.l.]: EDUSP, 1997. 18
- 18 Mathews, J.; Walker, R. L.; Davidon, W. C. Mathematical Methods of Physics. *American Journal of Physics*, v. 33, p. 246–246, mar. 1965. 18
- 19 SILVA, J.; LIMA, J. Quatro abordagens para o movimento browniano. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, scielo, v. 29, p. 25 – 35, 00 2007. ISSN 1806-1117. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172007000100007&nrm=iso>. 20
- 20 NEWMAN, M. E. et al. Random graphs as models of networks. *Handbook of graphs and networks*, Wiley Online Library, v. 1, p. 35–68, 2003. 23, 24
- 21 MACIEL, C. M. et al. Caminhadas quânticas de tempo contínuo: um tratamento na rede dendrímero modificado. Universidade Federal do Amazonas, 2018. 23, 46
- 22 GRIGOLETTI, P. S. Cadeias de markov. *Recuperado em*, v. 19, n. 10, p. 2014, 2011. 26
- 23 MEYN, S. P.; TWEEDIE, R. L. *Markov chains and stochastic stability*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. 26
- 24 ROSS, S. M. *Introduction to probability models*. [S.l.]: Academic press, 2014. 28
- 25 ALVES, R.; DELGADO, C. Processos estocásticos. 1997. 30
- 26 GROVER, L. K. A fast quantum mechanical algorithm for database search. *arXiv preprint quant-ph/9605043*, 1996. 37
- 27 AHARONOV, Y.; DAVIDOVICH, L.; ZAGURY, N. Quantum random walks. *Physical Review A*, APS, v. 48, n. 2, p. 1687, 1993. 38
- 28 VENANCIO, B. F. Caminhadas quânticas na rede hexagonal. 2016. 39
- 29 FARHI, E.; GUTMANN, S. Quantum computation and decision trees. *Physical Review A*, APS, v. 58, n. 2, p. 915, 1998. 40, 50
- 30 VOLTA, A.; MÜLKEN, O.; BLUMEN, A. Quantum transport on two-dimensional regular graphs. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 39, n. 48, p. 14997, 2006. 41
- 31 KULVELIS, N.; DOLGUSHEV, M.; MÜLKEN, O. Universality at breakdown of quantum transport on complex networks. *Physical review letters*, APS, v. 115, n. 12, p. 120602, 2015. 41

- 32 MACIEL, C. M.; STRUNZ, W. T.; GALICEANU, M. Quantum transport on modified multilayered spiderwebs. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 51, n. 49, p. 495301, nov 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F1751-8121%2Faae8ab>>. 46
- 33 MÜLKEN, O.; BLUMEN, A. Continuous-time quantum walks: Models for coherent transport on complex networks. *Physics Reports*, Elsevier, v. 502, n. 2-3, p. 37–87, 2011. 46
- 34 BARKAI, E. Ctrw pathways to the fractional diffusion equation. *Chemical Physics*, Elsevier, v. 284, n. 1-2, p. 13–27, 2002. 50

APÊNDICE A – Parâmetros para redes triangulares

Um caso simples, e que pode ser calculado analiticamente, é determinar os parâmetros: probabilidade quântica, de permanecer no ponto inicial, e ineficiência da rede triangular.

Para este caso, a rede fica como mostra a figura 14 e a matriz de conectividade é:

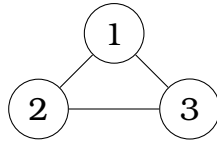


Figura 14 – Rede triangular: três nós, cada nó está ligado a outros dois.

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

Para determinar os parâmetros propostos, é necessário encontrar os autovalores e autovetores da matriz de conectividade. Essa matriz tem relação com o hamiltoniano do sistema, e nas equações (2.42), da probabilidade clássica e (2.65), probabilidade quântica de transição entre estados, os vetores $|q_n\rangle$ são autovetores da matriz de conectividade com autovalore λ_n .

Parata tanto, deve-se encontrar o polinômio característico de $Av = \lambda v$ então $(A - \lambda I)v = 0$:

$$\det \begin{vmatrix} 2 - \lambda & -1 & -1 \\ -1 & 2 - \lambda & -1 \\ -1 & -1 & 2 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{A.2})$$

Que fica,

$$\lambda(\lambda^2 - 6\lambda + 9) = 0 \quad (\text{A.3})$$

Assim os autovalores para a matriz A são: $\lambda' = 0$, $\lambda'' = \lambda''' = 3$. À vista disso, os autovetores associados podem ser determinados.

Para o autovalor $\lambda' = 0$, tem-se um autovetor que pode ser obtido fazendo o sistema de equações de $(A - \lambda'I)v' = 0$, onde I é a matriz identidade. Assim:

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

Fazendo o produto de matrizes, tem-se um sistema de equações:

$$2x - y - z = 0 \quad (\text{A.5})$$

$$-x + 2y - z = 0 \quad (\text{A.6})$$

$$-x - y + 2z = 0 \quad (\text{A.7})$$

Isolando z na (A.5), obtem-se $z = 2x - y$, e substituindo este valor em (A.6), chega a $x = y$, que retornando a expressão $z = 2x - y$ leva a $x = y = z$.

A família de autovetores que satisfazem este sistema pode ser descrita como:

$$x \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

Com $x \in \mathbb{R}$, outra restrição a este autovetor é que ele deve ser normal, pois, é um vetor de probabilidade. Assim:

$$|q_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle) \quad (\text{A.9})$$

$$\text{Onde } |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Para o autovalor $\lambda'' = \lambda''' = 3$, há dois autovetores associados. O sistema $(A - 3I)v = 0$ fica:

$$\begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

A única equação deste sistema é :

$$-x - y - z = 0$$

Então $z = -y - x$, assim a família de autovetores deve atender:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ -x - y \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

Com $x, y \in \mathbb{R}$. Daí um dos autovetores, que é normal:

$$|q_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |3\rangle) \quad (\text{A.12})$$

Para obter uma base ortonormal, é necessário que o terceiro seja perpendicular aos outros simultaneamente. Neste caso, para 3 vetores é simples, pois pode-se fazer o produto vetorial dos dois já conhecidos e chegar ao terceiro elemento da base. Quando for mais complicado, transforma-se a base qualquer obtida pela equação de autovetor numa base ortonormal através do método de Gram-Schmidt.

$$\begin{pmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

Que normalizando tem-se:

$$|q_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(-|1\rangle + 2|2\rangle - |3\rangle) \quad (\text{A.14})$$

Com todos os autovalores e autovetores de A determinados é possível calcular as probabilidades de transição clássica e quântica de sair de um estado $|1\rangle$

e depois de um tempo t está no vértice $|1\rangle$ (outras transições podem ser analisadas, mas a simetria dessa rede torna essa transição relevante). Calcular a ineficiência da rede também é possível e será feito nos próximos passos.

Na equação (2.42), calcula-se a probabilidade clássica $p_{11}(t)$:

$$p_{11}(t) = \sum_{n=1}^3 e^{\lambda_n t} \langle 1|q_n \rangle \langle q_n|1 \rangle \quad (\text{A.15})$$

Que abrindo a somatória e substituindo os autovalores e autovetores, tem-se:

$$p_{11}(t) = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}e^{-3t} \quad (\text{A.16})$$

Note que para tempos longos a expressão reduz-se a $\frac{1}{3}$. E Para t próximo a zero, ela vai para 1, como esperado para caminhadas aleatórias clássicas.

Utilizando a equação (2.65) para determinar a probabilidade quântica de transição $\pi_{11}(t)$:

$$\pi_{11}(t) = \left| \sum_{n=1}^3 e^{-\lambda_n t} \langle 1|q_n \rangle \langle q_n|1 \rangle \right|^2 \quad (\text{A.17})$$

Que desenvolvendo dá:

$$\pi_{11}(t) = \frac{5}{9} + \frac{4}{9}\cos 3t \quad (\text{A.18})$$

Note que se $t \rightarrow 0 \Rightarrow \pi_{11} \rightarrow 1$. Mas para tempos longos a característica oscilante tem bastante relevância na probabilidade de transição.

A ineficiência clássica é $\frac{1}{3} = 0.333...$, Esse parâmetro dá a medida de quão facilmente uma perturbação se propaga na rede. Quanto menor a ineficiência mais o transporte é eficiente, ou seja, mais rapidamente perturbações propagam-se na rede.

A ineficiência quântica é dada pela equação (2.70), assim:

$$\bar{\chi} = \frac{1}{N} \sum_{n,m} \delta_{\lambda_n, \lambda_m} |\langle 1|q_n \rangle|^2 |\langle 1|q_m \rangle|^2 \quad (\text{A.19})$$

Que leva, depois das devidas substituições:

$$\bar{\chi} = \frac{20}{108} \approx 0.18 \quad (\text{A.20})$$

APÊNDICE B – Relação de recorrência

Precisamos provar que:

$$P_{N+1}(m) = pP_N(m-1) + qP_N(m+1) \quad (\text{B.1})$$

Para tanto, note que usando a equação (2.6) para $N+1$ fica:

$$P_{N+1}(m) = \frac{N!(N+1)p^{\frac{N+1-m}{2}}q^{\frac{N+1+m}{2}}}{\left(\frac{N+1-m}{2}\right)!\left(\frac{N+1+m}{2}\right)!} \quad (\text{B.2})$$

Irei chamar:

$$A = \frac{N!p^{\frac{N+1-m}{2}}q^{\frac{N+1+m}{2}}}{\left(\frac{N+1-m}{2}\right)!\left(\frac{N+1+m}{2}\right)!} \quad (\text{B.3})$$

Desta forma a equação (B.2) fica:

$$P_{N+1}(m) = (N+1)A \quad (\text{B.4})$$

Agora, façamos $pP_N(m+1)$:

$$pP_N(m+1) = \frac{N!pp^{\frac{N-m-1}{2}}q^{\frac{N+1+m}{2}}}{\left(\frac{N-1-m}{2}\right)!\left(\frac{N+1+m}{2}\right)!} = \frac{N!p^{\frac{N+1-m}{2}}q^{\frac{N+1+m}{2}}}{\left(\frac{N+1-m}{2}\right)!\left(\frac{N+1+m}{2}\right)!} \left(\frac{N-m+1}{2}\right) \quad (\text{B.5})$$

Assim

$$pP_N = A \left(\frac{N-m+1}{2}\right) \quad (\text{B.6})$$

E para $qP_N(m-1)$

$$qP_N(m-1) = \frac{N!qp^{\frac{N-m+1}{2}}q^{\frac{N-1+m}{2}}}{\left(\frac{N+1-m}{2}\right)!\left(\frac{N-1+m}{2}\right)!} \left(\frac{N+m-1}{2}\right)$$

$$qP_N(m-1) = \frac{N!qp^{\frac{N-m+1}{2}}q^{\frac{N+1+m}{2}}}{\left(\frac{N+1-m}{2}\right)!\left(\frac{N+1+m}{2}\right)!} \left(\frac{N+1+m}{2}\right)$$

Assim

$$qP_N(m-1) = a \left(\frac{N+m+1}{2}\right) \quad (\text{B.7})$$

e somando as equações (B.4) e (B.7):

$$pP_N(m+1) + qP_N(m-1) = \frac{A}{2} (N+m+1 + N-m+1) = A(N+1) \quad (\text{B.8})$$

Ou seja,

$$P_{N+1}(m) = pP_N(m-1) + qP_N(m+1) \quad (\text{B.9})$$

Como queríamos demonstrar.

APÊNDICE C – Equação de difusão

Faremos $P_N(m) \rightarrow \mu(x, t)$, $P_{N+1}(m) \rightarrow \mu(x, t + \tau)$ e $P_N(m \pm 1) \rightarrow \mu(x \pm d, t)$. Onde τ é o intervalo de tempo para cada passo.

A equação (2.7) fica

$$\mu(x, t + \tau) = p\mu(x + d, t) + q\mu(x - d, t) \quad (\text{C.1})$$

Expandindo em série de Talor os termos para $\tau \rightarrow 0$ e $d \rightarrow 0$

$$\mu(x, t + \tau) = \mu(x, t) + \tau \frac{\partial \mu}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 \mu}{\partial t^2} + \dots \quad (\text{C.2})$$

$$\mu(x \pm d, t) = \mu(x, t) \pm d \frac{\partial \mu}{\partial x} + \frac{d^2}{2} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} \pm \dots \quad (\text{C.3})$$

Aproximando até segunda ordem e substituindo esses valores na equação (C.1):

$$\mu(x, t) + \tau \frac{\partial \mu}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 \mu}{\partial t^2} = p \left[\mu(x, t) + d \frac{\partial \mu}{\partial x} + \frac{d^2}{2} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} \right] + q \left[\mu(x, t) - d \frac{\partial \mu}{\partial x} + \frac{d^2}{2} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} \right]$$

Que após algum desenvolvimento leva:

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \mu}{\partial t^2} = -\frac{d(q-p)}{\tau} \frac{\partial \mu}{\partial x} + \frac{d^2}{2\tau} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} \quad (\text{C.4})$$

APÊNDICE D – Programa em Python

Python

Programa que calcula as probabilidades de transição clássica, quântica e a ineficiência de redes do tipo anel, além de gerar os gráficos associados.

```

1
2 import numpy as np
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 import math
5 from scipy import linalg as al
6
7 #Iara Lima dos Santos
8 #Redes ciclicas
9
10
11 #Procedimentos e funcoes
12
13
14 def delta(x,y):
15     if (x==y):
16         return 1
17     else:
18         return 0
19
20 def ineficiencia(e_vecs,e_vals,k,j):
21     p=0
22     for i in range(len(e_vals)):
23         for l in range(len(e_vals)):
24             p=p+delta(e_vals[i],e_vals[l])*(np.dot(k,e_vecs[i])*np.dot(e_vecs[i],j)*np.
                dot(k,e_vecs[l])*np.dot(e_vecs[l],j))
25     return p
26
27 def ineficienciaq(e_vecs,e_vals,k,j):
28     p=0
29     for i in range(len(e_vals)):
30         for l in range(len(e_vals)):

```

```
31 p=p+delta(e_vals[i],e_vals[l])*(np.dot(k,e_vecs[i])*np.dot(e_vecs[i],j)*np.  
    dot(k,e_vecs[l])*np.dot(e_vecs[l],j))  
32 return p  
33  
34  
35 def canonica(d):  
36 c = np.zeros((d,d),dtype=float)  
37 for i in range(d):  
38 c[i][i]=1  
39 return c  
40  
41 def adjacencia(d):  
42 a = np.zeros((d,d),dtype=float)  
43 a[0][1]=1  
44 a[0][d-1]=1  
45 a[d-1][0]=1  
46 a[d-1][d-2]=1  
47 for i in range(1,d-1):  
48 a[i][i+1]=1  
49 a[i][i-1]=1  
50 return a  
51 def adjlinear(d):  
52 a[0][1]=1  
53 a[0][d-1]=0  
54 a[d-1][0]=0  
55  
56  
57 for i in range(1,d-1):  
58 a[i][i+1]=1  
59 a[i][i-1]=1  
60  
61  
62 return a  
63 def grauno(d):  
64 n = np.zeros((d,d),dtype=float)  
65 for i in range(d):  
66 n[i][i]=2  
67 return n  
68 def graul(d):
```

```
69 n = np.zeros((d,d), dtype=float)
70 for i in range(d):
71     n[i][i]=2
72     n[0][0]=1
73     n[d-1][d-1]=1
74 return n
75 def pclassica(vecs, vals, k, j, tp):
76     p=0
77     for i in range(len(vals)):
78         s=math.exp(-tp*vals[i].real)*np.dot(k, vecs[i])*np.dot(vecs[i], j)
79     p=p+s
80 return p
81 def yclassico(vecs, vals, c, tempo):
82     yclassico = np.zeros(len(tempo), dtype=float)
83     for i in range(len(tempo)):
84         yclassico[i]=pclassica(vecs, vals, c[0], c[0], tempo[i])
85 return yclassico
86 def pquantica(vecs, vals, k, j, tp):
87     p=0j
88     for i in range(len(vals)):
89         s=np.exp(-tp*1j*vals[i].real)*np.dot(k, vecs[i])*np.dot(vecs[i], j)
90     p=p+s
91 return (math.pow(np.absolute(p), 2))
92 def yquantico(vecs, vals, c, tempo):
93     yquantico = np.zeros(len(tempo), dtype=float)
94     for i in range(len(tempo)):
95         yquantico[i]=pquantica(vecs, vals, c[1], c[1], tempo[i])
96 return yquantico
97 def yt(tempo):
98     ytq=np.zeros(len(tempo), dtype=float)
99     for i in range(len(tempo)):
100         ytq[i]=(1/9)*(5+4*(math.cos(3*tempo[i])))
101 return ytq
102
103 def yprquantico(vecs, vals, c, t):
104     yprq=np.zeros(len(vals), dtype=float)
105     for i in range(len(vals)):
106         yprq[i]=pquantica(vecs, vals, c[1], c[i], t)
107 return yprq
```



```
108
109
110
111 #tempo usado para plotar em escala normal
112 tp=np.arange(0,20,0.1, dtype=float)
113 #tempo usado para plotar em escala logaritmica
114 tempo =np.arange(0,100,0.01, dtype=float)
115
116 #
117 #
118 #      Grafico com probabilidades classicas de 3,5,7,9 e 99
119 #          P de 1 para 1
120 #
121 #
122
123
124 plt.xlabel('Tempo(s)')
125 plt.ylabel('Probabilidade')
126
127
128 d=3
129 for i in range(3):
130 c=canonica(d)
131 a = adjacencia(d)
132 n = grauno(d)
133 L=n-a
134 vals, vecs=al.eig(L)
135 vecs,r=al.qr(vecs)
136 vecs=vecs.transpose()
137 y=yclassico(vecs,vals,c,tp)
138 plt.plot(tp,y,label=str(d))
139 d=d+2
140 d=100
141 c=canonica(d)
142 a = adjacencia(d)
143 n = grauno(d)
144 L=n-a
145 vals, vecs=al.eig(L)
146 vecs,r=al.qr(vecs)
```

```
147 vecs=vecs.transpose()
148 y=yclassico(vecs,vals,c,tp)
149 plt.plot(tp,y,label=str(100))
150 plt.legend(title='Numero de nos')
151 plt.savefig('pclassica'+str(d))
152 plt.cla()
153
154
155 #
156 #
157 #   Grafico com probabilidades quantica para rede de 3 nos
158 #       P 1 para 1
159 #
160 #
161
162 #probabilidade quantica sem log
163
164 #de comecar em um dado no e ainda estar(ou voltar) a ele em tempo
165 d=3
166 c=canonica(d)
167 a = adjacencia(d)
168 n = grauno(d)
169 L=n-a
170 vals, vecs=al.eig(L)
171 vecs,r=al.qr(vecs)
172 vecs=vecs.transpose()
173
174 #plt.title(u'Probabilidade quantica rede ciclica de 3 nos')
175 plt.xlabel('Tempo(s)')
176 plt.ylabel('$\pi_{1,1}$')
177 plt.grid(False)
178
179 y=yquantico(vecs,vals,c,tp)
180 t=yt(tp)
181 #grafico teorico para 3 nos
182 plt.plot(tp,t,'-',color='deepskyblue',label='teorico')
183
184
185
```

```
186 #grafico numerico
187 plt.plot(tp,y,'.',color='navy',label='numerico')
188
189 plt.legend(title='Resultados')
190 plt.savefig('pquanticalog'+str(d))
191
192 plt.cla()
193
194 #
195 #     Grafico probabilidade quantica para 3,5,7 e 100 nos
196 #
197 #
198 #
199
200
201 #plt.title(u'Probabilidade quantica rede ciclica de 3,5,7 e 100 nos')
202 plt.xlabel('Tempo(s)')
203 plt.ylabel('$\pi_{1,1}$')
204 plt.grid(False)
205
206 for i in range(10):
207 c=canonica(d)
208 a = adjacencia(d)
209 n = grauno(d)
210 L=n-a
211 vals, vecs=al.eig(L)
212 vecs,r=al.qr(vecs)
213 vecs=vecs.transpose()
214 y=yquantico(vecs,vals,c,tempo)
215 plt.plot(tempo,y,label=str(d))
216 plt.savefig('pquanticalog'+str(i))
217 plt.cla()
218 d=d+1
219
220 plt.xlabel('Tempo(s)')
221 plt.ylabel('$\pi_{1,1}$')
222 plt.grid(False)
223
224
```

```
225 d=100
226 c=canonica(d)
227 a = adjacencia(d)
228 n = grauno(d)
229 L=n-a
230 vals, vecs=al.eig(L)
231 vecs,r=al.qr(vecs)
232 vecs=vecs.transpose()
233 y=yquantico(vecs,vals,c,tempo)
234 plt.semilogx(tempo,y,label=str(100))
235 plt.legend(title='Numero de nos')
236
237
238 plt.savefig('pquanticalog')
239
240 plt.cla()
241
242 # Gafico da ineficiencia da rede
243
244 #plt.title(u'Ineficiencia na rede ciclica de 3 a 100 nos')
245 plt.ylabel(u'Ineficiencia')
246 plt.xlabel(u'Numero de nos')
247
248 y=np.zeros(100, dtype=float)
249 y1=np.zeros(100, dtype=float)
250
251 for i in range(3,100):
252 c=canonica(i)
253 a = adjacencia(i)
254 n = grauno(i)
255 L=n-a
256 vals, vecs=al.eig(L)
257 vecs,r=al.qr(vecs)
258 vecs=vecs.transpose()
259 y1[i]=1/i
260 y[i]=ineficiencia(vecs,vals,c[0],c[0])/i
261
262
263
```

```
264
265 plt.plot(range(3,100),y[3:100],'.',color='maroon',label='Quantica')
266 plt.plot(range(3,100),y1[3:100],'.',color='navy',label='Classica')
267 plt.legend(title='Ineficiencia')
268
269 plt.savefig('ginefic')
270
271 plt.cla()
```