

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE-UFS

Jefferson José Ximenes

**CAMINHADAS QUÂNTICAS EM TEMPO DISCRETO EM
REDE PEQUENO MUNDO**

São Cristóvão-SE

2020

Jefferson José Ximenes

**CAMINHADAS QUÂNTICAS EM TEMPO DISCRETO EM
REDE PEQUENO MUNDO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal de Sergipe como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Dr. André Maurício Conceição de Souza

São Cristóvão-SE

2020

Jefferson José Ximenes

**CAMINHADAS QUÂNTICAS EM TEMPO DISCRETO EM
REDE PEQUENO MUNDO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal de Sergipe como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

**Dr. André Maurício Conceição de
Souza**
Orientador

**Dr. Guilherme Martins Alves de
Almeida**

Dr. Francisco Assis Gois de Almeida

São Cristóvão-SE
2020

Este trabalho é dedicado à minha mãe.

Agradecimentos

Agradeço a Deus e a minha família que me ajudaram e confortaram nos momentos mais difíceis deste trabalho.

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal e Nivel Superior (CAPES) pela bolsa que financiou o desenvolvimento deste trabalho.

Ao meu orientador André Maurício por toda ajuda, trabalho de orientação e esclarecimentos.

Aos meus amigos Ismael, Rosivan, Cassia, Valéria, Wallysson, Weldem, Jaelsson, Leo, Allan, Cleidiane e Iury e aos professores Nilson Ferreira e Juan Bulnes que prestaram apoio e sempre se dispuseram a me ajudar no andamento deste trabalho.

Aos demais amigos Diego, Jussara, Geisiane, Matheus, Emanuel, Marcus Grilo, Marcus Prado, John e Iranildo pelas discussões durante as disciplinas e momentos de descontração.

Resumo

O caminho aleatório quântico, além de ser naturalmente utilizado na modelagem de sistemas desta escala, tem sido amplamente empregado na construção de algoritmos quânticos. Neste último, tanto sua formulação em tempo contínuo quanto em discreto, em alguns casos apresentam melhor desempenho quando comparados a algoritmos que usam caminho aleatório clássico. Dentre essas formulações, a literatura tem dado destaque ao uso da caminhada quântica em tempo discreto, em especial, sua aplicabilidade em redes complexas. A rede pequeno mundo faz parte desse tipo de estrutura. Neste trabalho, é apresentado a caminhada quântica em tempo discreto sobre esta rede, analisando o comportamento da distribuição de probabilidade com a variação dos parâmetros q , que determina a topologia da rede, e k , que define a vizinhança mais próxima do vértice. É definido um formalismo que descreve esta dinâmica, permitindo simular numericamente a caminhada. A evolução das distribuições de probabilidade em função dos parâmetros revelam sua tendência de espalhamento, em direção a uniformidade. Entre essa transição, encontra-se um regime diferentemente do característico comportamento balístico em uma rede circular. Há uma tentativa de determinar uma lei de escala para descrever essa evolução, funcionando apenas para um pequeno intervalo dos parâmetros.

Palavras-chave: Caminhadas quânticas. Tempo discreto. Rede pequeno mundo.

Abstract

The quantum walks, besides being naturally used in the modeling of systems of this scale, has been widely used in the building quantum algorithms. In the last, both its formulation in continuous and discrete time, in some cases, presents better performance when compared to algorithms that use classical random walk. Among these formulations, the literature has highlighted the use of quantum walk in discrete time, in particular, its applicability in complex networks. The small world network is part of this type of structure. In this work, the discrete time quantum walk on this network is presented, analyzing the behavior of the probability distribution with the variation of the parameters q , which determines the topology of the network, and k , which defines the neighborhood closest to the vertex. A formalism is defined that describes this dynamic, allowing to numerically simulate the walk. The evolution of the probability distributions versus parameters reveals its tendency to spread, towards uniformity. Between this transition, there is a regime different from the characteristic ballistic behavior in a circular network. There is an attempt to determine a law of scale to describe this evolution, working only for a small range of parameters.

Keywords: Quantum walker. Discrete time. Small world network.

Lista de figuras

Figura 1 – Rede unidimensional infinita	23
Figura 2 – Rede unidimensional com N vértices.	27
Figura 3 – Religamento das arestas de uma rede anel	30
Figura 4 – Tipos de ligações.	32

Lista de gráficos

Gráfico 1 – Resultados numéricos para caminhada quântica.	22
Gráfico 2 – Simulação para os estados iniciais $ \psi(0)\rangle = +\rangle 0\rangle$ e $ \psi(0)\rangle = -\rangle 0\rangle$. . .	24
Gráfico 3 – Simulação para o estado inicial $ \psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(+\rangle + i -\rangle) 0\rangle$	25
Gráfico 4 – Variância da caminhada clássica e quântica.	26
Gráfico 5 – Distribuição de comprimento dos caminhos no experimento de Stanley Milgram.	29
Gráfico 6 – Caracterização das redes geradas pelo modelo	31
Gráfico 7 – Evolução temporal da probabilidade de transição quântica para $N = 10$ e $N = 100$	35
Gráfico 8 – Evolução temporal da probabilidade de transição quântica para $N =$ 10000	36
Gráfico 9 – Evolução temporal da probabilidade de transição quântica para $N =$ 10000	36
Gráfico 10 – Simulação CQTD em rede k -regular, $q = 0$	39
Gráfico 11 – Simulação CQTD em rede aleatória, $q = 1$	39
Gráfico 12 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $q = 0,1$	40
Gráfico 13 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $q = 0,5$	40
Gráfico 14 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $q = 0,7$	41
Gráfico 15 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $q = 0,9$	41
Gráfico 16 – Variância para CQTD em rede pequeno mundo, $q = 0,7; 0,9$ e $k = 4, 6$	42
Gráfico 17 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $k = 2$	42
Gráfico 18 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $k = 4$	43
Gráfico 19 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $k = 6$	43
Gráfico 20 – Análise do parâmetro de Reescala.	44
Gráfico 21 – Reescala $q = 0,1$	44
Gráfico 22 – Reescala $q = 0,5$	45
Gráfico 23 – Reescala $q = 0,7$	45
Gráfico 24 – Reescala $q = 0,9$	46
Gráfico 25 – Simulação do caminho aleatório clássico.	55

Lista de abreviaturas e siglas

CQTD	Caminhada quântica em tempo discreto
CQTC	Caminhada quântica em tempo contínuo

Sumário

1	INTRODUÇÃO	19
2	CAMINHADA QUÂNTICA	21
2.1	Caminhada quântica em tempo discreto	22
2.1.1	Variância	26
2.2	Caminhada quântica em tempo contínuo	27
3	REDE PEQUENO MUNDO E EM CAMPO MÉDIO	29
3.1	Rede pequeno mundo	29
3.2	Rede pequeno mundo em campo médio	32
3.2.1	Espectro da Matriz Laplaciana	32
3.2.2	Caminhada quântica em tempo contínuo	35
4	CAMINHADA QUÂNTICA EM TEMPO DISCRETO EM REDE PEQUENO MUNDO	37
4.1	Formulação da dinâmica na rede	37
4.2	Resultados e discussões	38
5	CONCLUSÕES	47
	Referências	49
	APÊNDICE A – OPERADOR TRANSLAÇÃO	53
	APÊNDICE B – CAMINHO ALEATÓRIO CLÁSSICO UNI- DIMENSIONAL	55
	APÊNDICE C – ANÁLISE DE FOURIER DO CAMINHANTE DE HADAMARD	57
	APÊNDICE D – INVERSA DOS AUTOVETORES DA MA- TRIZ CIRCULANTE	61

1 INTRODUÇÃO

A definição de caminho aleatório clássico foi dada pelo estatístico Karl Pearson, em uma carta intitulada "The Problem of the Random Walker", enviada a revista *Nature* e destinada aos seus leitores (1). Nesta carta, Pearson descreve o problema como o caminhar de um homem, onde a cada l jardas muda sua direção aleatoriamente. O problema reside em, após n passos, determinar a probabilidade de encontrá-lo a uma distância entre r e $r + \delta r$ do seu ponto de origem.

Um fato curioso foi que Major Ronald Ross (Laureado com o Prêmio Nobel de Medicina em 1902 pelo seu trabalho sobre malária) foi quem induziu Pearson para este problema ao estudar a migração de mosquitos (2). Dentre as respostas a sua carta, a solução mais satisfatória (3) foi dada por Lord Rayleigh (4), cujo resultado foi fruto de seus trabalhos sobre vibrações. Portanto, como observa-se nesse pequeno recorte histórico, por ser um problema essencialmente estatístico, o caminho aleatório está presente em outras áreas além da matemática e física, como biologia, economia e finança (5).

Em 1993 Y. Aharonov, L. Davidovich e N. Zagury (6) introduzem, de modo explícito, o conceito de caminho aleatório quântico. Este tipo de dinâmica é o correspondente quântico do caminho aleatório para partículas clássicas (6). Richard Feynman em 1982 fez uma versão para esta dinâmica (7), o qual apresenta a ideia de computadores quânticos. Da mesma forma, Meyer em 1995 (8), impulsionado pelo trabalho de Feynman e pela crescente literatura a respeito da aplicabilidade de propriedades quânticas para fins computacionais (8), aplica este tipo de dinâmica ao estudar autômatos celulares quânticos como arquitetura natural para estes novos dispositivos.

Essas dinâmicas apresentadas em (6, 8) são classificados pela literatura como discretos no tempo, devido a modelagem consistir em passos de tempos discretos. Por outro lado, existe o caminho quântica em tempo contínuo, inicialmente introduzido por Farhi e Gutmann em 1998 (9). Mesmo tratando-se de dinâmicas diferentes, há uma relação entre elas, tal que, dentro de um certo limite é possível obter o caminho aleatório em tempo contínuo a partir do discreto (10).

As aplicações das caminhadas quânticas são variadas. A própria formulação dinâmica pode ser usada para modelar sistemas físicos, como a transferência de energia em sistemas biológicos (11) e absorção em sistemas ópticos (12). Após o trabalho de Deutsch em 1984 (13), que realiza uma generalização quântica da máquina de Turing, que segundo ele, pode melhor simular um sistema físico, há um gradativo aumento no desenvolvimento de algoritmos quânticos. Exemplos são os algoritmos que visam calcular logaritmos discretos, fatorar números inteiros (14), de busca (15) e PageRank (16, 17). Assim como sua versão

clássica, o algoritmo quântico PageRank tem sido realizado sobre redes complexas, cuja dinâmica corresponde a um caminhante quântico (17).

Este contexto evidencia a relevância do tema, ao investigar a caminhada quântica em tempo discreto em rede pequeno mundo. Nesta dissertação, é definida uma formulação para o estudo desta dinâmica, mais especificamente para uma partícula de spin $1/2$. Os resultados são obtidos numericamente. Toda simulação desenvolvida neste trabalho usa linguagem Python 3.7.4, cuja as operações numéricas fazem uso de funções definidas no pacote Numpy e os gráficos utilizando o pacote Matplotlib 3.1.1.

Esta dissertação está estruturada em uma breve introdução as caminhadas quânticas, apresentadas no capítulo 2, desenvolvendo a dinâmica de uma partícula de spin $1/2$ sobre uma rede unidimensional infinita, tanto no contexto de tempo discreto quanto no contínuo. Para formulação em tempo discreto, é feita simulações sobre a rede unidimensional, além da apresentação de sua solução analítica. Enquanto que para o contínuo no tempo, segue-se com o desenvolvimento de sua solução analítica. No capítulo 3 é apresentado a rede pequeno mundo e sua variante, rede pequeno mundo em campo médio. Neste último, são apresentados o espectro da sua matriz laplaciana e, conseqüentemente, a dinâmica em caminhada quântica em tempo contínuo nessa rede. No capítulo 4, apresenta-se a formulação desenvolvida para a dinâmica da caminhada quântica em tempo discreto na rede pequeno mundo. Dessa forma, simula-se a caminhada da partícula para diferentes valores dos parâmetros que definem a topologia da rede, q , e a vizinhança dos vértices, k . No capítulo 5 finaliza-se com as conclusões dos resultados obtidos numericamente.

2 CAMINHADA QUÂNTICA

Em uma dimensão, a caminhada quântica consiste em a partícula realizar passos para direita ou esquerda, dependendo da medida da componente z de seu spin. Dado o operador relacionado a esta medida, $\hat{S}_z$, seus autoestados são $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, respectivamente denominados estados up e down, logo,

$$\hat{S}_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle, \quad (2.1)$$

onde $\pm\hbar/2$ são seus autovalores. Sendo $\hat{P}$ o operador momento, o operador translação é definido como, ver apêndice A,

$$e^{\frac{-i\hat{P}l}{\hbar}}|\psi(x_0)\rangle = |\psi(x_0 - l)\rangle, \quad (2.2)$$

com l sendo o comprimento do passo da partícula que se encontra no estado $|\psi(x_0)\rangle$. Portanto, o operador de evolução do sistema é (equivalente ao originalmente definido em (6))

$$\hat{U} = |-\rangle\langle -| \otimes e^{\frac{i\hat{P}l}{\hbar}} + |+\rangle\langle +| \otimes e^{-\frac{i\hat{P}l}{\hbar}}. \quad (2.3)$$

Estando o sistema no estado $(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle)|\psi(x_0)\rangle$, onde, $|c_-|^2 + |c_+|^2 = 1$, após um passo (operar $\hat{U}$ no estado) é obtido

$$|\Psi\rangle = c_-|-\rangle|\psi(x_0 + l)\rangle + c_+|+\rangle|\psi(x_0 - l)\rangle. \quad (2.4)$$

Logo, se a medida do spin for $+\hbar/2$, a partícula encontra-se no estado $|\psi(x_0 - l)\rangle$, do contrário, $|\psi(x_0 + l)\rangle$.

Depois de N passos, tem-se que o deslocamento médio, $\langle x \rangle = \langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle - x_0$, onde $\hat{x}$ é o operador posição, coincide com o esperado classicamente.

$$\langle x \rangle = Nl (|c_+|^2 - |c_-|^2). \quad (2.5)$$

Uma outra proposta é medir o spin ao longo de uma direção (θ, ϕ) (6), cujo operador é $\hat{S} \cdot \vec{n}$ (18), onde, $\hat{S} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ e $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ um vetor unitário. Os autovalores desse operador são $\pm\hbar/2$, cujo os autovetores (19)

$$|\theta, \phi, +\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|-\rangle, \quad (2.6)$$

$$|\theta, \phi, -\rangle = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|+\rangle - e^{i\phi}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|-\rangle. \quad (2.7)$$

Então, calculando a inversa da combinação dada pelas equações acima reescreve-se a equação 2.4 na base desses autovetores:

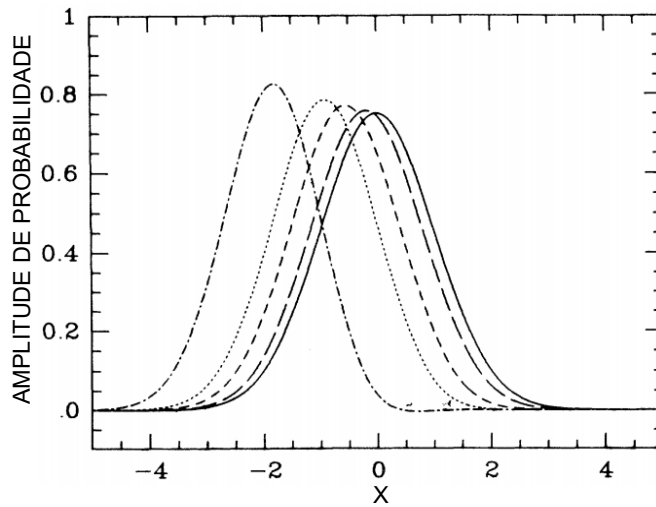
$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(c_+|\psi(x_0 - l)\rangle + c_-e^{-i\phi}\tan\left(\frac{\theta}{2}\right)|\psi(x_0 + l)\rangle \right) |\theta, \phi, +\rangle + \\ & - e^{-i\phi}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \left(c_-|\psi(x_0 + l)\rangle - c_+e^{i\phi}\tan\left(\frac{\theta}{2}\right)|\psi(x_0 - l)\rangle \right) |\theta, \phi, -\rangle. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Dessa forma, dependendo do resultado da medida do spin, $\pm\hbar/2$, a partícula estará no estado de configuração:

$$|\Psi'_{\pm}\rangle = Z_{\pm}^{1/2} \left(c_{\pm} e^{\mp i\hat{P}l/\hbar} \pm c_{\mp} e^{\mp i\phi} \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\pm i\hat{P}l/\hbar} \right) |\psi(x_0)\rangle, \quad (2.9)$$

onde $Z_{\pm}$ é a constante de normalização. Para o limite l muito menor que a espessura espacial de $|\psi(x_0)\rangle$ (6), definido como Δx , e $\tan(\theta/2) = |c_-/c_+|(1+\epsilon)$, tal que $l(\Delta x)^{-1} \ll |\epsilon| \ll 1$, são obtidos resultados numéricos para uma função de onda inicial $\psi_{x_0}(x) = e^{-x^2/2}/\pi^{1/4}$, dados no gráfico 1.

Gráfico 1 – Resultados numéricos para caminhada quântica.



Fonte: Modificada de (6). Amplitude de probabilidade da posição da partícula, para $\epsilon = -0.1$ e $l = 0.01$. linha sólida representa a função de onda inicial, de tracejado longo para um passo, tracejado curto três passos, pontilhada cinco passos e pontilhada e tracejada dez passos.

Logo, é visível que o deslocamento da distribuição após dez passos é muito maior que a quantidade classicamente permitida (6). Este resultado é justificado por propriedades quânticas do sistema, devido diretamente a interferências entre as amplitudes de probabilidade da partícula se deslocar para direita ou esquerda em cada passo (6). Após esta introdução, são apresentadas os dois tipos de caminhadas quânticas, em uma rede unidimensional, com suas respectivas soluções.

2.1 Caminhada quântica em tempo discreto

A caminhada quântica em tempo discreto (CQTD) segue o mesmo princípio da dinâmica definida acima, em que o sentido da translação depende do spin da partícula. A diferença entre elas reside na construção do operador $\hat{U}$, que neste caso apresenta uma operação específica sobre as componentes de spin, semelhante a mudança de base realizada anteriormente e responsável pelo resultado distinto da dinâmica clássica.

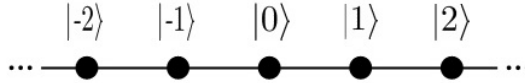
A partir deste momento, cada passo corresponde a uma evolução temporal discreta. Uma vez definido um adequado operador $\hat{U}$ e sendo essa variação no tempo igual a uma unidade, o estado $|\psi(t)\rangle$, para $t > 0$, é obtido pela operação

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}^t |\psi(0)\rangle, \quad (2.10)$$

onde $|\psi(0)\rangle$ é o estado inicial do sistema.

Considera-se, então, uma partícula de spin $1/2$ em uma rede unidimensional infinita. A rede é ilustrada na figura 1 onde os vértices representam os sítios no qual a partícula pode estar, e as arestas indicam os vizinhos que a ela pode migrar com um único passo. Os correspondentes estados quânticos relacionados a sua localização nos vértices são dados pelos vetores $|m\rangle$, base ortonormal do espaço de Hilbert H_∞ , tal que m é um inteiro, $m \in \mathbb{Z}$.

Figura 1 – Rede unidimensional infinita



Fonte: Autor. Pontilhados representam a continuidade da rede.

O operador $\hat{U}$ é composto de duas partes, sendo a primeira uma operação que modifica as componentes do espaço de spin, também denominado de espaço de moeda, $\hat{C} \otimes \hat{I}_\infty$, onde $\hat{C}$ é o operador moeda, definido de acordo com o problema, e $\hat{I}_\infty$ é o operador identidade do espaço H_∞ . Assim como em (20) é escolhido que o operador moeda seja o operador Hadamard, $\hat{H}_d$. Caminhante de Hadamard é o nome dado a dinâmica que usa este operador. Na base de spin, o operador Hadamard é representado matricialmente:

$$\hat{H}_d = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

e operacionalmente é dado por

$$\begin{cases} \hat{H}_d|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) \\ \hat{H}_d|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle) \end{cases}. \quad (2.12)$$

Como observa-se na equação acima, este operador gera um estado de superposição para um dado estado de moeda, classicamente análogo ao lançamento de uma moeda. Observa-se ainda a imparcialidade do operador moeda Hadamard, já que a probabilidade de obter cada estado de moeda, após aplicação do operador, é a mesma, propriedade que justifica sua escolha inicial a título de introdução.

A outra parte consiste em uma operação que modifica os estados de H_∞ , aplicado na sequência do primeiro, dado por:

$$\hat{S} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (|+\rangle\langle+| \otimes |m+1\rangle\langle m| + |-\rangle\langle-| \otimes |m-1\rangle\langle m|). \quad (2.13)$$

Operacionalmente tem-se

$$\begin{cases} \hat{S}|+\rangle|m\rangle = |+\rangle|m+1\rangle \\ \hat{S}|-\rangle|m\rangle = |-\rangle|m-1\rangle \end{cases} \quad (2.14)$$

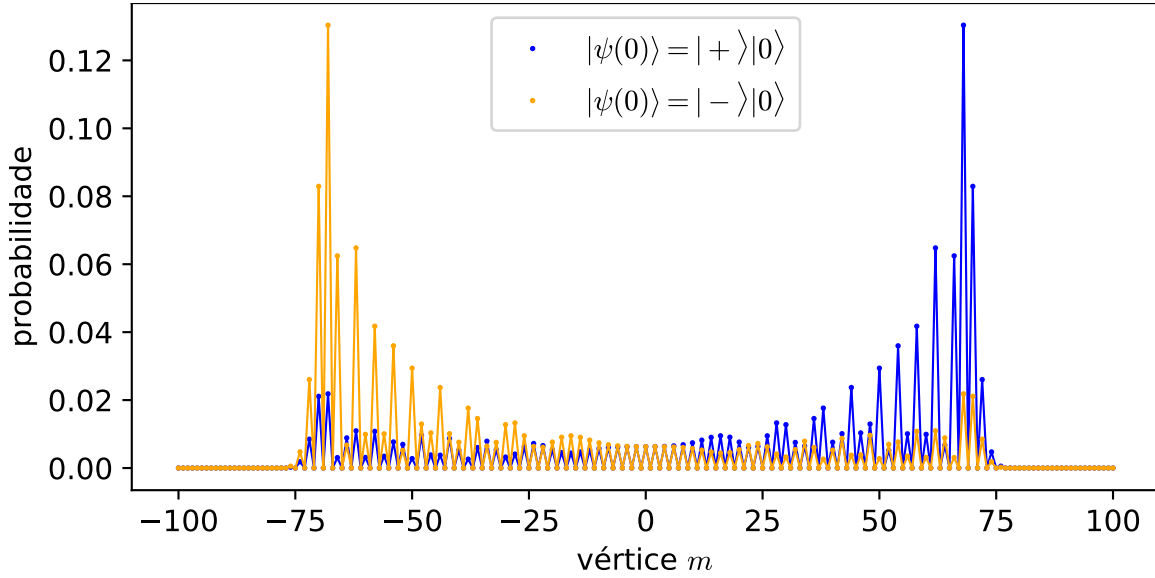
Logo, seguindo a orientação da figura 1, se a componente do vetor estiver com estado moeda $|+\rangle$ ($|-\rangle$), a partícula é deslocada para direita (esquerda).

Então, para este problema, o operador $\hat{U}$ passa a ser denotado por

$$\hat{U} = \hat{S} \bullet (\hat{H}_d \otimes \hat{I}_N). \quad (2.15)$$

Portanto, agora simula-se o problema calculando numericamente a operação do operador unitário para determinadas funções de onda inicial. Segue-se nos graficos 2 e 3, a simulação para 100 passos, dos estados iniciais $|\psi(0)\rangle = |+\rangle|0\rangle$, $|\psi(0)\rangle = |-\rangle|0\rangle$ e $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i|-\rangle)|0\rangle$ (21).

Gráfico 2 – Simulação para os estados iniciais $|\psi(0)\rangle = |+\rangle|0\rangle$ e $|\psi(0)\rangle = |-\rangle|0\rangle$.

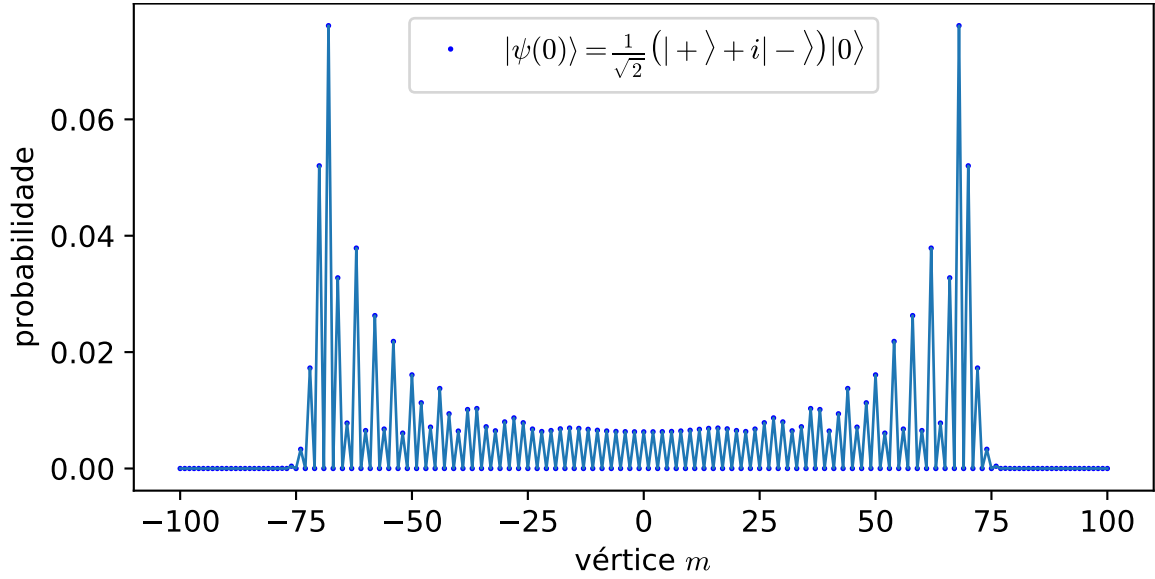


Fonte: Autor. Distribuição de probabilidade discreta dos vértices em uma rede infinita pela dinâmica da caminhada quântica em tempo discreto, para 100 passos.

Comparando com o resultado clássico, do apêndice B, verifica-se que a partícula em CQTD tem maior probabilidade em estar mais afastado do ponto de origem. No trabalho de Nayak e Vishwanath (22) encontra-se a solução analítica para a CQTD em uma dimensão. Inicia-se com a amplitude de probabilidade da partícula estar em m no tempo t é escrita como

$$\Psi(m, t) = \begin{pmatrix} \psi_+(m, t) \\ \psi_-(m, t) \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

onde as componentes correspondem, da primeira para segunda linha, respectivamente a amplitude de probabilidade da partícula estar com spin up e down. Uma vez que nesta

Gráfico 3 – Simulação para o estado inicial $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i|-\rangle)|0\rangle$.

Fonte: Autor. Distribuição de probabilidade discreta dos vértices em uma rede infinita pela dinâmica da caminhada quântica em tempo discreto, para 100 passos.

notação o estado de spin corresponde a posição no vetor coluna, o operador Hadamard, equação 2.11, pode ser dividido em duas operações:

$$H_d \Psi(m, t) = M_+ \Psi(m, t) + M_- \Psi(m, t) \quad (2.17)$$

onde,

$$M_+ = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

tal que, como resultado de suas operações, é obtido novas amplitudes de probabilidade da partícula está, respectivamente, com spin up ou down.

Uma partícula só pode migrar para a posição m no tempo $t + 1$, se estiver nos estados: $\Psi(m + 1, t)$ com spin up ou $\Psi(m - 1, t)$ com spin down. Portanto, de 2.17, obtém-se a seguinte relação de recorrência:

$$\Psi(m, t + 1) = M_+ \Psi(m - 1, t) + M_- \Psi(m + 1, t). \quad (2.19)$$

Esta relação é resolvida pelo autores por meio da transformada de Fourier, ver apêndice C, onde é considerado que a função de onda inicial é

$$\Psi(m, t) = \begin{pmatrix} \delta(m) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

onde $\delta(m)$ é a delta de Dirac. Com isso, as componentes da função de onda são:

$$\psi_+(m, t) = \frac{1 + (-1)^{m+t}}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \left(1 + \frac{\cos(k)}{\sqrt{1 + \cos^2(k)}} \right) e^{i w_k t - i k m}, \quad (2.21)$$

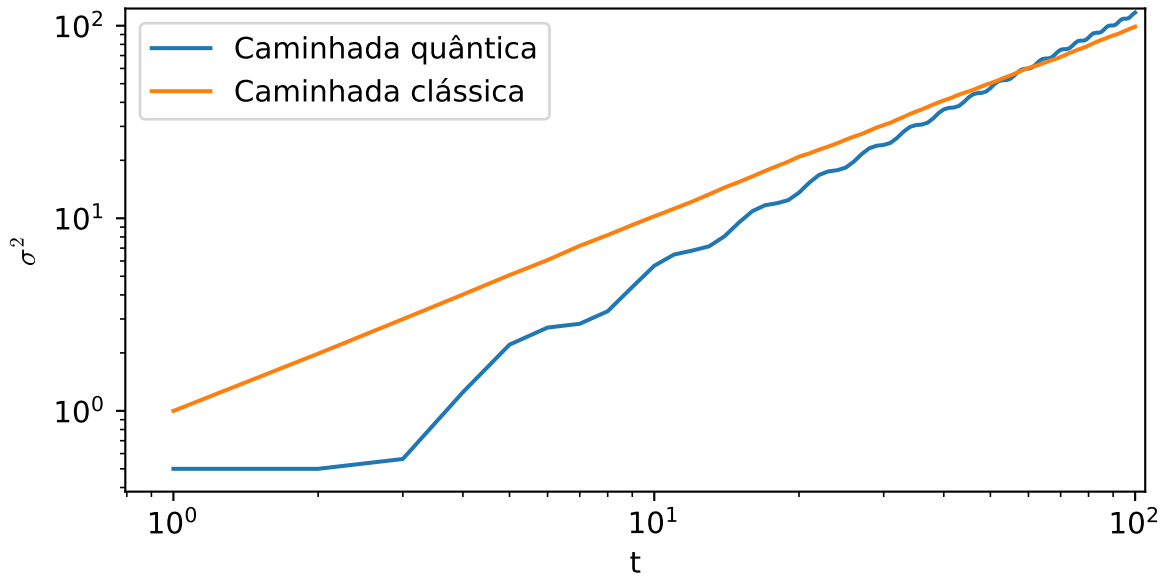
$$\psi_{-}(m, t) = \frac{1 + (-1)^{m+t}}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{-ik}}{\sqrt{1 + \cos^2(k)}} e^{iw_k t - ikm}, \quad (2.22)$$

observa-se que para m par e t ímpar, da mesma para o caso contrário, as amplitudes são nulas (22), como esperado dos resultados numéricos.

2.1.1 Variância

Considerando todas as possíveis posições de um caminhante clássico em cada passo, é possível determinar o valor médio da posição do caminhante em função dos passos, t , assim como a média do quadrado das posições. Dessa forma, é possível determinar tanto o desvio padrão, σ , quanto a variância, σ^2 , das posições, como uma maneira de caracterizar a dinâmica. Para caminhada clássica é conhecido que $\sigma^2 \sim t$ (23), classificando como processo difusivo normal. O gráfico 4 apresenta a variância da simulação de um caminhante clássico apresentado no apêndice B.

Gráfico 4 – Variância da caminhada clássica e quântica.



Fonte: Autor. Gráfico em escala logarítmica. Variância em função dos passos t , para o caso clássico e quântico. A variância para o caso clássico é o resultado da simulação de 10000 partículas partindo da origem ao longo de uma direção.

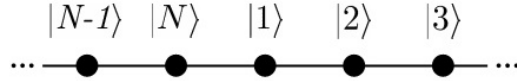
Para cada aplicação do operador $\hat{U}$ sobre um estado inicial $|\psi(0)\rangle$, é possível determinar a probabilidade de a partícula está em determinada posição. Logo, é possível determinar as médias e as médias dos quadrados das possíveis posições a serem ocupadas pela partícula durante a dinâmica. O gráfico 4 exemplifica a variância da caminhada quântica para o estado inicial $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + i|-\rangle) |0\rangle$, cuja distribuição de probabilidade é apresentada no gráfico 3. A variância para CQTD em uma dimensão é da ordem de $\sigma^2 \sim t^2$ (23), denominado de processo balístico, diferente do caso clássico.

Em geral, $\sigma^2 \sim t^\mu$, os processos podem ser classificados, como normal, $\mu = 1$, subdifusivo, $\mu < 1$, ou super difusivo, $\mu > 1$ (24). Portanto, o caso balístico faz parte de um processo super difusivo.

2.2 Caminhada quântica em tempo contínuo

Para apresentação da caminhada quântica em tempo contínuo (CQTC), diferentemente da seção anterior, é conveniente que a rede unidimensional possua N vértices, logo, é necessário um espaço de Hilbert H_N . Considera-se que N seja muito maior que a quantidade de primeiros vizinhos de cada vértice, portanto, utiliza-se condição periódica de contorno $|N+1\rangle = |1\rangle$. A figura 2 ilustra a rede.

Figura 2 – Rede unidimensional com N vértices.



Fonte: Autor. Pontilhados representam a continuidade da rede.

O Hamiltoniano $\hat{H}$ do problema é

$$\hat{H} = - \left(\sum_{m=1}^{N-1} |m+1\rangle \langle m| + \sum_{m=2}^N |m-1\rangle \langle m| \right). \quad (2.23)$$

Escrevendo a sua representação matricial na base $\{|m\rangle \in H_N\}$, observa-se que a mesma é uma matriz circulante de ordem $N \times N$,

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ -1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Os autovalores e autovetores desse tipo de matriz já são conhecidos (25), tal que, sendo os elementos da primeira linha $(d_0, d_1, \dots, d_{N-1})$, são eles, respectivamente,

$$E_n = \sum_{j=0}^{N-1} d_j e^{-i \frac{2\pi j n}{N}}, \quad (2.25)$$

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^N e^{-i \frac{2\pi(m-1)n}{N}} |m\rangle, \quad (2.26)$$

onde, $\{n \in \mathbb{Z} | n \in [0, N-1]\}$. Portanto, da equação (2.24); $c_1 = c_{N-1} = -1, c_0 = c_3 = \dots = c_{N-2} = 0$; as autoenergias do sistema são:

$$\begin{aligned} E_n &= -e^{-i \frac{2\pi n}{N}} - e^{-i \frac{2\pi(N-1)n}{N}} \\ &= -2\cos\left(\frac{2\pi}{N}n\right). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Uma vez que o hamiltoniano é independente do tempo e dado que o estado inicial seja um estado da rede, $|\psi(0)\rangle = |m\rangle$, a dinâmica é dada pela equação (19):

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|m\rangle. \quad (2.28)$$

Escreve-se $|m\rangle$ como combinação dos autoestados do sistema, calculando a inversa de 2.26, como demonstrado no apêndice D,

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi(m-1)n}{N}} |\phi_n\rangle, \quad (2.29)$$

que aplicando em 2.28:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi(m-1)n}{N}} e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\phi_n\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi(m-1)n}{N}} e^{i2t\cos(\frac{2\pi}{N}n)/\hbar} |\phi_n\rangle. \end{aligned} \quad (2.30)$$

É conhecido que (26)

$$e^{i2t\cos(\frac{2\pi}{N}n)/\hbar} = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^l J_l\left(\frac{2t}{\hbar}\right) e^{i\frac{2\pi n}{N}l}, \quad (2.31)$$

onde J_l é a função de Bessel. Portanto, reescrevendo a equação 2.30, obtém-se a solução

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^l J_l\left(\frac{2t}{\hbar}\right) e^{i\frac{2\pi}{N}[(m-1)+l]n} |\phi_n\rangle. \quad (2.32)$$

Nas seções subsequentes será apresentado um outro método de determinar a CQTC em uma rede, sem necessariamente definir um Hamiltoniano. Tal método é bastante conveniente para analisar a dinâmica em redes complexas, como a rede pequeno mundo.

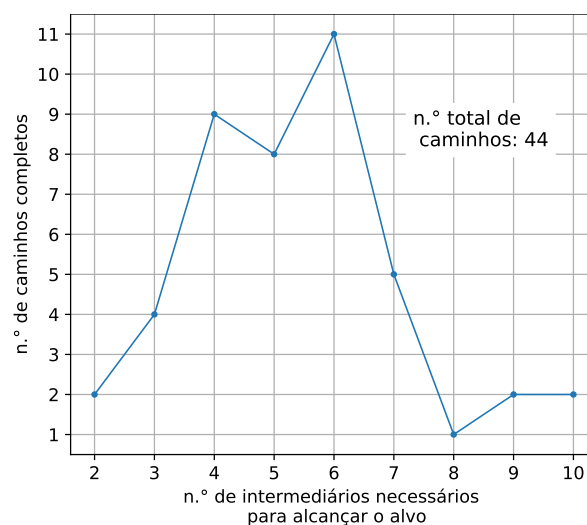
3 REDE PEQUENO MUNDO E EM CAMPO MÉDIO

Neste capítulo apresenta-se a rede pequeno mundo e a descrição analítica dos autovalores da matriz Laplaciana relacionada a rede. Esta descrição é retirada do trabalho desenvolvido por Carsten Grabow, Stefan Grosskinsky e Marc Timme (27), que usam uma aproximação de campo médio.

3.1 Rede pequeno mundo

Uma fala popular dita ao se descobrir que possui um amigo em comum com uma pessoa que acabou de conhecer é "Esse mundo é pequeno!". Esse tipo de conexão entre pessoas desconhecidas revela uma interessante propriedade presente na estrutura da rede social. Uma análise experimental desse fenômeno feita por Stanley Milgram (28) tornou possível mensurar, dada duas pessoas distantes uma da outra, o número médio de indivíduos com algum tipo de ligação (parentes, amigos, colegas) entre elas. O experimento, realizado nos Estados Unidos, consistia em escolher aleatoriamente pessoas em Omaha, no estado de Nebraska, como pontos de partida de correspondências para um corretor que vivia no estado de Massachusetts. Cada correspondência poderia apenas ser entregue passando-a por pessoas conhecidas e que tivessem mais chance de fazê-la alcançar o destinatário. Ao final, as correspondências possuíam listas com os nomes das pessoas pelas quais passaram, cuja a mediana foi de, impressionante, 5 pessoas.

Gráfico 5 – Distribuição de comprimento dos caminhos no experimento de Stanley Milgram.



Fonte: Reproduzido de (28).

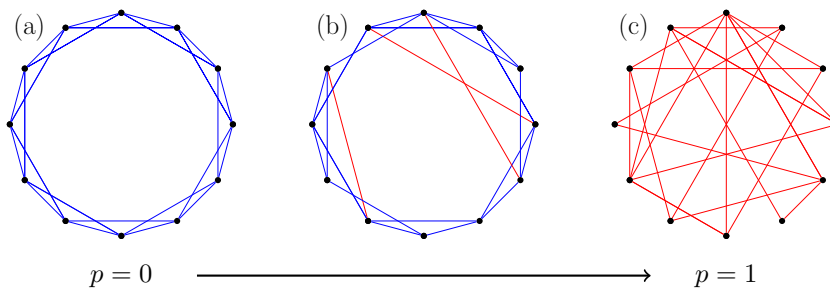
Com a curva de distribuição de comprimento dos caminhos, como mostra o gráfico 5, onde o comprimento corresponde ao número de pessoas pelas quais a correspondência

passou, e o fato de apenas 27,5% das correspondências chegarem ao seu destino foi feito um modelo matemático, que revelou a possível existência de comprimentos mais longos. Esses dados atrelados a um experimento auxiliar realizado em Boston, capital de Massachusetts, pelo mesmo autor mostrou que 48% dos caminhos passaram por 3 pessoas, evidenciando pontos principais de transmissão. Esses resultados moldam a figura de uma rede pequeno mundo (28).

Uma caracterização matemática mais precisa desse tipo de rede está presente no trabalho de Watts e Strogatz (29), realizada através do comprimento de caminho característico, L , e o coeficiente de agrupamento, C . Desde que entre todos os vértices existem caminhos, há um número mínimo de arestas que os interligam, e a média de todos esses mínimos é a quantidade L (29). Partindo da mesma condição anterior, cada vértice v possui k_v vizinhos. Isso significa que entre eles podem haver no máximo $k_v(k_v - 1)/2$ arestas (29). Dessa forma, defini-se uma quantidade C_v como a razão entre o número arestas que existem e a capacidade máxima. O coeficiente de agrupamento passa a ser a média de todos os valores C_v (29). Em uma rede social essas quantidades representam, respectivamente, o número médio do mínimo de conhecidos que existem entre duas pessoas e a probabilidade média de que indivíduos com conhecidos em comum também se conheçam (29).

O modelo de Watts e Strogatz (29) reproduz essa rede através de alguns religamentos aleatórios das arestas de uma rede regular. O procedimento consiste em, partindo de uma rede anel de n vértices e k vizinhos, cortar arestas escolhidas com probabilidade p de seus vértices e religa-las a outros escolhidos uniformemente (29). A figura 3 ilustra a evolução das configurações das arestas conforme o aumento da probabilidade. Esse mecanismo torna a caracterização em função de p , $C = C(p)$ e $L = L(p)$, que permite ajustar a rede em regular ($p = 0$), pequeno mundo ($0 < p < 1$) e aleatória ($p = 1$), como exemplifica a figura 3.

Figura 3 – Religamento das arestas de uma rede anel

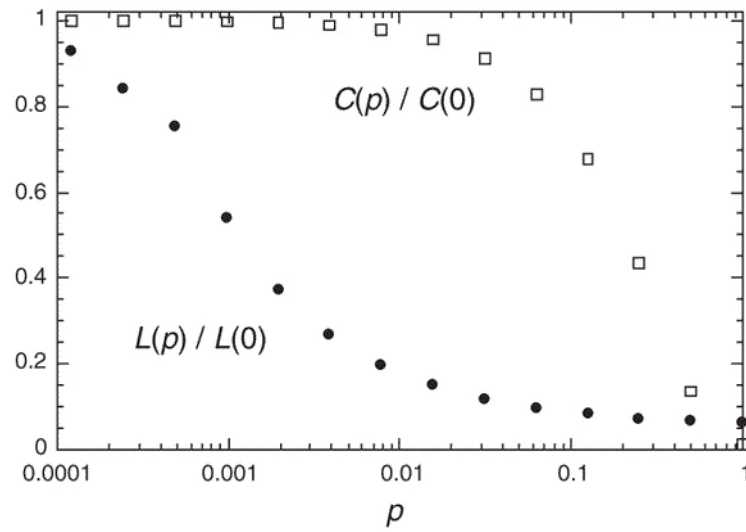


Fonte: Autor. Grafos com 12 vértices e um total de 24 arestas. As arestas vermelhas representam as religações. O grafo (a) representa a rede regular, (b) a rede pequeno mundo e (c) a rede aleatória. A seta abaixo dos grafos indica o aumento da probabilidade p .

O gráfico 6 apresenta os resultados da aplicação do modelo gerador a uma rede de

mil vértices, cada um, em média, com dez vizinhos. Para $p \rightarrow 0$, os valores são próximos ao da rede regular, enquanto que $p \rightarrow 1$, da rede aleatória (29). Comparando as duas redes, a regular apresenta altos valores de C e L , portanto, trata-se de uma estrutura altamente clusterizada e de mundo grande (29). O religamento de algumas arestas dessa rede é suficiente para gerar uma acentuada queda em L . Diferentemente, os valores de C pouco variam frente as modificações (29). Consequentemente, existe uma extensa região de p que configura a rede pequeno mundo em altamente clusterizadas com pequenos comprimentos de caminho característicos (29).

Gráfico 6 – Caracterização das redes geradas pelo modelo



Fonte: (29). Os dados são a média de 20 realizações aleatórias, do processo de religamento das arestas (29). Os resultados tem sido normalizados pelo valores da rede regular $C(0)$ e $L(0)$. Devido a rápida queda de $L(p)$ foi usado a escala logarítmica (29).

A rede pequeno mundo está presente em outras redes além das sociais, como em redes cerebrais (30, 31) e de transporte (32, 33), onde as descrições também podem ser feitas por adaptações do modelo apresentado (34, 35, 36). Esses ajustes podem permitir análises mais detalhadas das redes (32). Por exemplo, para redes de transporte, considerar as distâncias físicas é essencial no estudo da eficiência da mobilidade urbana (32). O mesmo ocorre para os cálculos de L e C , que são, em alguns casos, substituídas por outras propriedades que fornecem o mesmo tipo de informação. Cita-se aqui o conceito de transitividade, originado da análise de redes sociais (32). Essa quantidade é similar a C , pois determina a fração de conexões triplas de vértices que formam triângulos (32, 36).

O estudo de caminhadas quânticas em variados tipos de redes complexas também abrange a rede pequeno mundo (37). Para o caso em que a caminhada é contínua no tempo, apesar da aleatoriedade de distribuição das ligações nessa rede, é possível obter resultados analíticos para essa dinâmica em função do número de vértices e arestas, como mostram as seções a seguir.

3.2 Rede pequeno mundo em campo médio

3.2.1 Espectro da Matriz Laplaciana

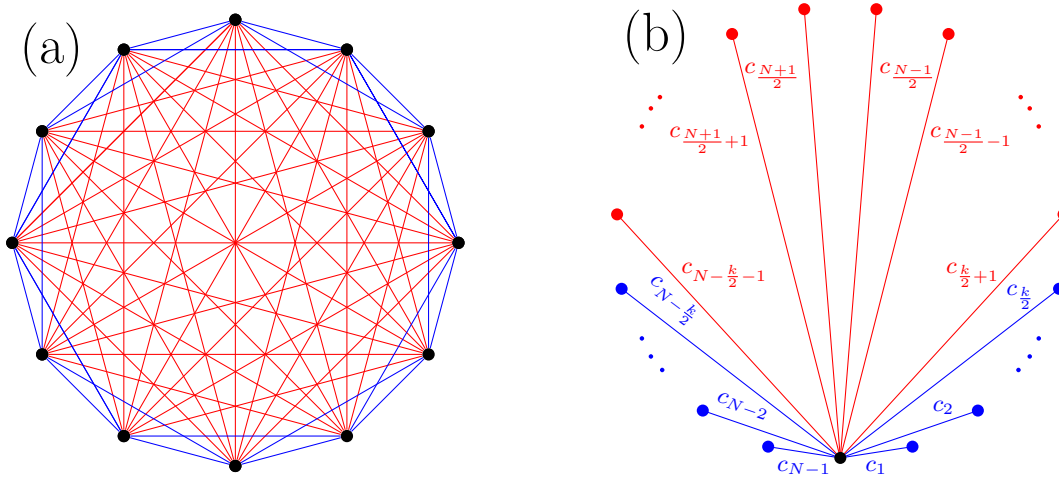
Para um dado grafo é possível associar uma matriz Laplaciana L (38) e seguindo a notação de (27), para um grafo k regular (cada vértice possui k arestas), esta matriz é definida como

$$L = -kI + A, \quad (3.1)$$

onde A é a matriz adjacência. As linhas e colunas da matriz Laplaciana são indexadas pelos vértices, tal que, se os vértices u e v são adjacentes (estão ligados por uma aresta) o elemento A_{uv} é 1, do contrário 0 (38). Porém, esta matriz pode ser generalizada para grafos com pesos e o elemento A_{uv} passa a ser o peso atribuído a ligação. Esta matriz é utilizada para estudar tanto caminhadas aleatórias clássicas quanto quânticas (39, 40).

Os seus autovalores são denominados espectro da rede. Para determiná-los de forma analítica, para o caso da rede pequeno mundo, em (27) é definido um grafo cuja as arestas possuem pesos, que correspondem a probabilidade de cada aresta existir. Os autores inicialmente definem dois conjuntos de ligações, as k mais próximas e as demais distantes, como mostra o exemplo da figura 4 (a). Rotulando as ligações por c_i , são definidos $S_1 := \{i = 1, \dots, \frac{k}{2}, N - \frac{k}{2}, \dots, N - 1\}$, que representam as ligações mais próximas, e as demais $S_2 := \{i = \frac{k}{2} + 1, \dots, N - \frac{k}{2} - 1\}$, como mostra a figura 4 (b).

Figura 4 – Tipos de ligações.



Fonte: Autor. A figura (a) apresenta um grafo com 12 vértices e $k = 4$, onde as 4 ligações mais próximas são representadas de azul, e as demais de vermelho. Na figura (b) temos uma representação dos rótulos para o n -ésimo vértice, representado por preto. Os vértices e arestas em azul, na figura (b), indicam as k ligações mais próximas, e os pontos menores representam a continuidade da rede.

Logo, em geral a matriz Laplaciana é

$$L = \begin{pmatrix} c_0 & c_1 & c_2 & \cdots & c_{N-1} \\ c_{N-1} & c_0 & c_1 & c_2 & \cdots \\ & c_{N-1} & c_0 & c_1 & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ c_1 & c_2 & \cdots & c_{N-1} & c_0 \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

onde $c_0 = -k$.

Os elementos de um grafo k regular com peso 1 são

$$c_i = \begin{cases} -k & \text{se } i = 0, \\ 1 & \text{se } i \in \{1, \dots, \frac{k}{2}, N - \frac{k}{2}, \dots, N - 1\}, \\ 0 & \text{se } i \in \{\frac{k}{2} + 1, \dots, N - \frac{k}{2} - 1\}, \end{cases} \quad (3.3)$$

isso significa que as ligações em vermelho na figura 4, nesse caso, não existem.

Dada a probabilidade q de cortar uma aresta, $1 - q$ corresponde a de permanecer ligada. Então, uma vez que o grafo regular possui $N\frac{k}{2}$ arestas, $qN\frac{k}{2}$ é o total cortados e $(1 - q)N\frac{k}{2}$ restantes em S_1 . Por outro lado, o número de ligações cortadas em S_1 também significa o de arestas ausentes neste conjunto, definido por $f_1 = qN\frac{k}{2}$. Cada vértice pode estar ligado no máximo a $N - 1$ arestas, logo, no total pode haver $N\frac{(N-1)}{2}$ em um grafo. Dessa forma, o total de arestas ausentes após os cortes é

$$f = N\frac{(N-1)}{2} - (1 - q)N\frac{k}{2}. \quad (3.4)$$

Consequentemente, o número de arestas ausentes em S_2 , que também é a quantidade máxima deste conjunto, é

$$f_2 = N\frac{(N-1)}{2} - qN\frac{k}{2}. \quad (3.5)$$

Assim, a probabilidade de haver arestas ausentes em S_1 e S_2 são respectivamente f_1/f e f_2/f . Agora, a probabilidade da aresta, a ser religada, ir para um determinado conjunto, consiste em dividir o número de arestas cortadas com a quantidade máxima de cada conjunto. Portanto, a probabilidade de a aresta ir para S_1 ou S_2 é respectivamente:

$$w_1 = \frac{f_1}{f} \frac{qN\frac{k}{2}}{N\frac{k}{2}} = \frac{q^2k}{N-1-(1-q)k}, \quad (3.6)$$

$$w_2 = \frac{f_2}{f} \frac{qN\frac{k}{2}}{N\frac{(N-1)}{2} - qN\frac{k}{2}} = \frac{qk}{N-1-(1-q)k}. \quad (3.7)$$

Então, os elementos da matriz Laplaciana na teoria de campo médio de (27) são:

$$c_i = \begin{cases} -k & \text{se } i = 0, \\ 1 - q + w_1 & \text{se } i \in S_1, \\ w_2 & \text{se } i \in S_2. \end{cases} \quad (3.8)$$

A matriz 3.2 é uma matriz circulante, logo, os autovalores são dados pela equação 2.25 da seção 2.2. Aqui, seguindo a notação do artigo (27), os autovalores, λ_l ; para $l = 1, \dots, N$; são

$$\begin{aligned}\lambda_l &= \sum_{j=0}^{N-1} c_j e^{-\frac{2\pi i(l-1)j}{N}} \\ &= c_0 + \sum_{j=1}^{k/2} c_j e^{-\frac{2\pi i(l-1)j}{N}} + \sum_{j=k/2+1}^{N-1-k/2} c_j e^{-\frac{2\pi i(l-1)j}{N}} + \sum_{j=N-k/2}^{N-1} c_j e^{-\frac{2\pi i(l-1)j}{N}}.\end{aligned}\quad (3.9)$$

Pela equação 3.8,

$$\lambda_l = -k + kc' \sum_{j=1}^{k/2} x_l^j + kc'' \sum_{j=k/2+1}^{N-1-k/2} x_l^j + kc' \sum_{j=N-k/2}^{N-1} x_l^j, \quad (3.10)$$

onde,

$$x_l^j = e^{-\frac{2\pi i}{N}(l-1)j}, \quad c' = \frac{(1-q)}{k} + qc'', \quad c'' = \frac{q}{N-1-(1-q)k}.$$

Usando as propriedades, $x_l^{N-j} = x_l^{-j}$, $2 \cos(-2\pi i(l-1)/N) = x_l^j + x_l^{-j}$ e consequentemente

$$\begin{aligned}\sum_{j=0}^{N-1} x_l^j &= 1 + \sum_{j=1}^{k/2} x_l^j + \sum_{j=k/2+1}^{N-k/2-1} x_l^j + \sum_{j=N-k/2}^{N-1} x_l^j \\ &= 1 + \sum_{j=1}^{k/2} 2 \cos\left(-\frac{2\pi i}{N}(l-1)j\right) + \sum_{j=k/2+1}^{N-k/2-1} x_l^j = 0,\end{aligned}$$

a equação 3.10 é reescrita:

$$\lambda_l = -k + kc' \sum_{j=1}^{k/2} 2 \cos\left(\frac{2\pi i}{N}(l-1)j\right) - kc'' \left(1 + \sum_{j=1}^{k/2} 2 \cos\left(\frac{2\pi i}{N}(l-1)j\right)\right). \quad (3.11)$$

Sabendo que (26)

$$\sum_{j=1}^{k/2} 2 \cos\left(\frac{2\pi i}{N}(l-1)j\right) = \frac{\text{sen}\left(\frac{(k+1)(l-1)\pi}{N}\right)}{\text{sen}\left(\frac{(l-1)\pi}{N}\right)} - 1,$$

os autovalores são:

$$\lambda_l = -k + kc' + k(c' - c'') \frac{\text{sen}\left(\frac{(k+1)(l-1)\pi}{N}\right)}{\text{sen}\left(\frac{(l-1)\pi}{N}\right)}. \quad (3.12)$$

Os autores mostram que este modelo se ajusta muito bem aos espectros determinados numericamente. Na prática, é analisada a comparação do segundo maior autovalor, $l = 2$, obtido da equação 3.12, com resultados numéricos.

3.2.2 Caminhada quântica em tempo contínuo

Dado os espectros determinados por (27), apresenta-se agora a análise da dinâmica da CQTC nesta rede, desenvolvida em (41). A dinâmica é analisada pela probabilidade de transição quântica entre dois vértices

$$\Pi_{mj}(t) = \left| \langle m | e^{-itL} | j \rangle \right|^2. \quad (3.13)$$

Então, dada as inversas dos autovetores pela equação D.7, obtém-se

$$\Pi_{mj}(t) = \left| \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} e^{-i[t\lambda_l - \frac{2\pi}{N}(m-j)l]} \right|^2. \quad (3.14)$$

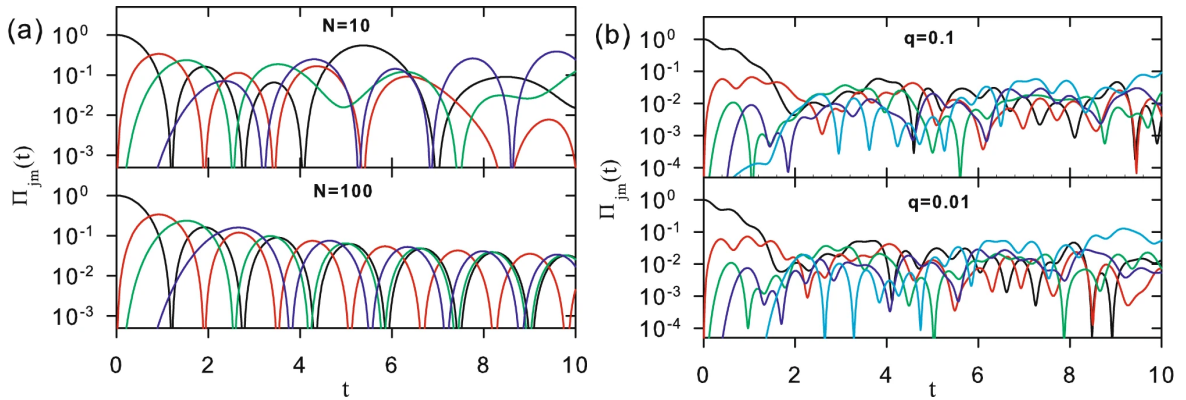
Usando ainda a relação de Euler e $\cos(A-B) = \cos(A)\cos(B) + \sin(A)\sin(B)$, reescreve-se a equação acima

$$\Pi_{mj}(t) = \frac{1}{N^2} \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{p=0}^{N-1} \cos \left[\theta_{mj}^l(t) - \theta_{mj}^p(t) \right], \quad (3.15)$$

onde $\theta_{mj}^l(t) = t\lambda_l - \frac{2\pi}{N}(m-j)l$. Como observa-se, a diferença entre a probabilidade de transição para diferentes vértices depende somente do $|m-j|$ (41).

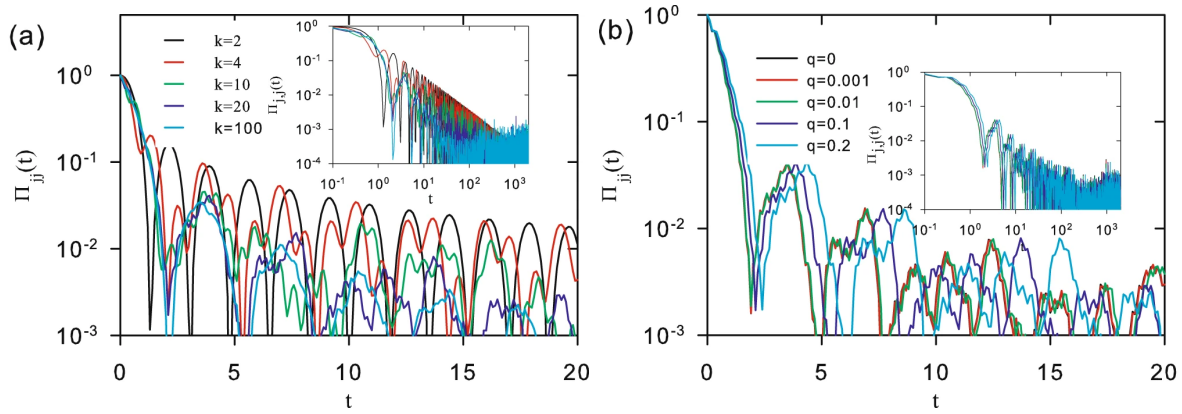
Com este resultado, é desenvolvido em (41) a análise numérica para $0 \leq q < 1$.

Gráfico 7 – Evolução temporal da probabilidade de transição quântica para $N = 10$ e $N = 100$.

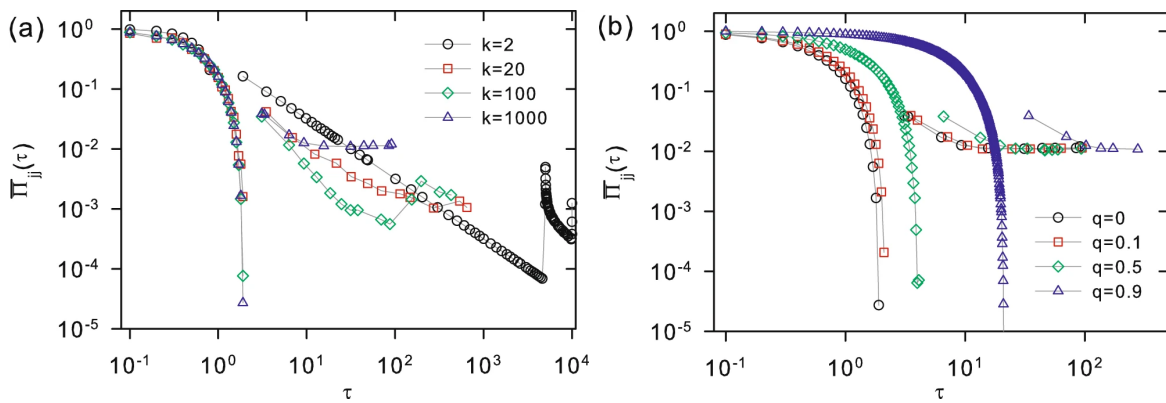


Fonte: (41). (a) Curvas para $q = 0$, $k = 2$, tal que, são representados para diferentes valores de $|m-j|$, sendo eles, 0 de preto, 1 de vermelho, 2 de verde e 4 de azul. (b) Curvas para $N = 100$ e $k = 20$, onde $|m-j| = 0$ dada pela curva de preto, 1 de vermelho, 10 de verde, 50 de azul.

Evidentemente é obtido um padrão oscilatório, tal que, é observado um decaimento destas oscilações, principalmente para grandes valores de N (41). Para observar este decaimento, é realizados duas séries dos máximos locais da transição de probabilidades, como mostrado no gráfico 9. Destaca-se o decaimento exponencial, dependentes somente de q e k e o decaimento polinomial.

Gráfico 8 – Evolução temporal da probabilidade de transição quântica para $N = 10000$.

Fonte: (41). (a) Curvas para $q = 0.1$. (b) Curvas para $k = 20$.

Gráfico 9 – Evolução temporal da probabilidade de transição quântica para $N = 10000$.

Fonte: (41). (a) Curvas para $q = 0.1$. (b) Curvas para $k = 20$.

4 CAMINHADA QUÂNTICA EM TEMPO DISCRETO EM REDE PEQUENO MUNDO

A estrutura e aleatoriedade das arestas na rede pequeno mundo conduzem uma partícula em CQTD, para uma dinâmica caracterizada por passos que a migrem para vértices aleatoriamente escolhidos. Diferentemente do caso unidimensional, nesta rede existe a possibilidade da partícula, em um único passo, "pule" para vizinhos muito mais distantes. Neste capítulo, apresenta-se o trabalho desenvolvido para formular e simular esta dinâmica na rede.

4.1 Formulação da dinâmica na rede

Da mesma forma que as seções anteriores, a dinâmica trabalhada aqui é de uma partícula de spin $1/2$, portanto, possuindo os estados de moeda $|+\rangle, |-\rangle$. Considera-se que a rede tenha um número de vértices N ímpar e k par, tornando possível associar uma quantidade de vizinhos igualmente divididos para ambos os lados de cada vértice. Assim como no caso unidimensional, para cada passo a mudança do estado de configuração da partícula, pode ser para direita, caso spin seja $|+\rangle$, ou esquerda, $|-\rangle$. Porém, não apenas mudando para os primeiros vizinhos. Logo, utiliza-se da seção 3.2.1 os dois tipos de ligações, as que ocorrem nos k primeiros vizinhos, denominado comunidade S_1 , e as que ocorrem com os demais, S_2 . Porém, agora, empregando as equações 3.8, estes dois tipos de ligações são caracterizados respectivamente pelas constantes:

$$c'_1 = \frac{kq - (1-q)(k - N + 1)}{N - 1 - (1-q)k} \quad c'_2 = \frac{kq}{N - 1 - (1-q)k}. \quad (4.1)$$

Assume-se um operador moeda mais geral:

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

O operador translação, em virtude da aleatoriedade, varia para cada passo de tempo:

$$\hat{S}_p = |0\rangle\langle 0| \otimes \sum_m |m+j\rangle\langle m| + |1\rangle\langle 1| \otimes \sum_m |m-j\rangle\langle m|; \quad (4.3)$$

onde j é escolhido através da distribuição

$$P_i(j) = P(l)P_i(j_\alpha), \quad (4.4)$$

em que

$$\begin{cases} P(l) = P_1\delta_{l,l_1} + P_2\delta_{l,l_2} \\ P_i(j_\alpha) = \frac{1}{N_\alpha} \sum_{k_\alpha=1}^{N_\alpha} \delta_{j_\alpha, k_\alpha} \end{cases}, \quad (4.5)$$

com

$$P_1 = \frac{c'_1}{c'_1 + c'_2}, \quad P_2 = \frac{c'_2}{c'_1 + c'_2}, \quad (4.6)$$

onde, $l_\alpha = (l_1, l_2)$ são os dois tipos de ligações, j_α o conjunto de ligações do tipo α e N_α o número de ligações j_α .

Então, a dinâmica consiste em, a cada passo, inicialmente escolher com probabilidade P_α o tipo de ligação (ou vizinhança), ou seja, escolher se a partícula deve migrar para vértices mais próximos ou distantes. Depois, ocorre a escolha do vértice (equiprováveis), enquanto que o sentido depende do spin da partícula.

Observa-se das equações 4.1 a relação $c'_1 \geq c'_2$, que implica

$$P_1 \geq P_2, \quad (4.7)$$

sendo igual para $q = 1$. Obviamente para $q = 0$ tem-se grafo k -regular, enquanto $P_1 = 1$, aleatório. Esta relação torna-se importante para entender o comportamento apresentado nas simulações desta dinâmica.

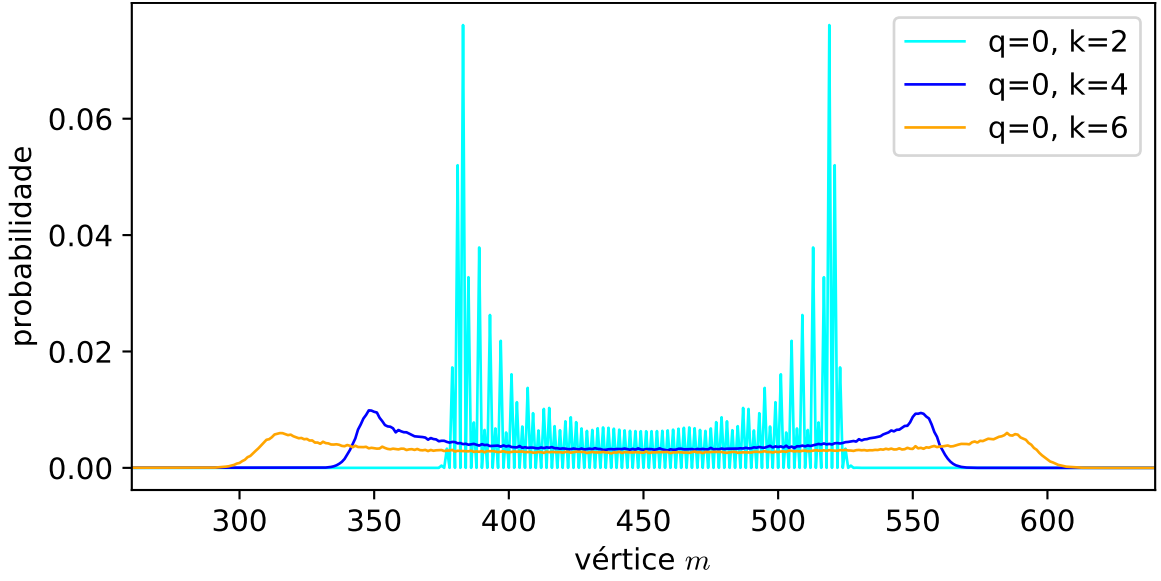
4.2 Resultados e discussões

Através do modelo, são realizadas simulações numéricas para rede contendo $N = 901$ vértices, para 100 passos. A partícula se encontra no estado inicial

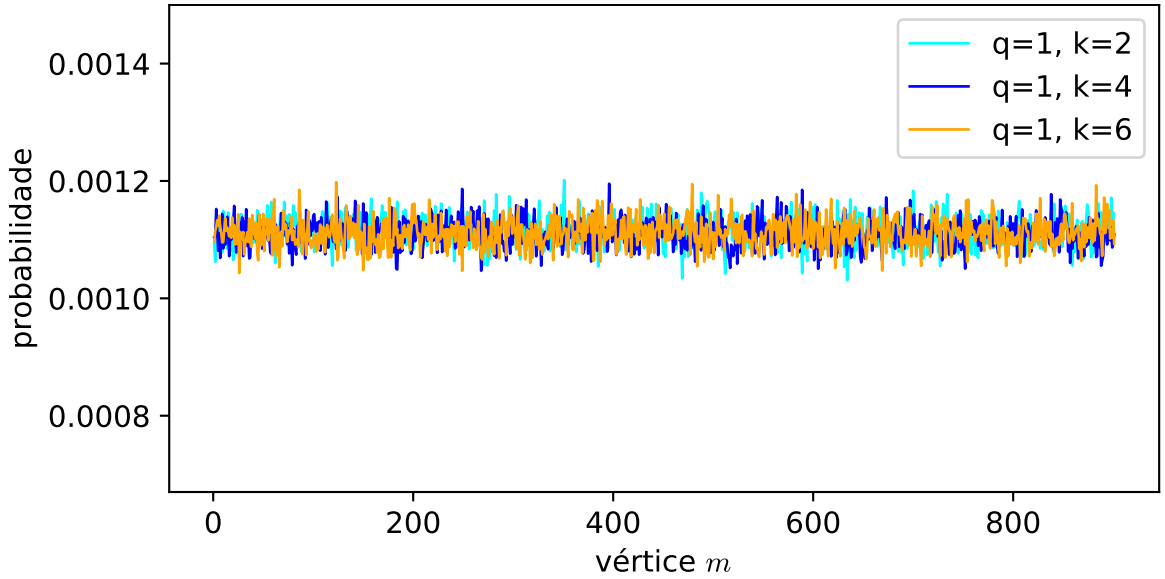
$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + i|1\rangle) |451\rangle. \quad (4.8)$$

Para obter simetria nas distribuições de probabilidade, usa-se a moeda de Hadamard, $\theta = \pi/4$. Cada simulação de caminhada, com respectivo valor de q e k , foi repetida por 5000 vezes, tal que, a distribuição final dos passos corresponde a média de todos resultados.

Inicialmente, avalia-se o modelo para as redes k -regular e aleatória, $q = 0; 1$, com $k = 2, 4, 6$, nos gráficos 10 e 11. Estes gráficos apresentam, por definição, o comportamento que deve ser obtido ao se aproximar dos limite do intervalo de definem a rede pequeno mundo, $0 < q < 1$. As curvas se justificam pela inequação 4.7. Para $q = 0$, a partícula permanece limitada a ocupar vértices entre os primeiros vizinhos, inicialmente definidos por k . Desta maneira, para $k = 2$, a distribuição equivale ao da caminhada quântica sobre uma extensa rede circular, logo, igual ao caso unidimensional da seção 2.1. Para $k = 4, 6$; a distribuição segue com formato característico do comportamento balístico. Porém, na região central de maior probabilidade de encontrar a partícula não há locais o qual a probabilidade seja nula, como no caso $k = 2$. Para $q = 1$, a situação de equiprobabilidade da escolha da vizinhança e idem seleção do vértice não conduz a partícula a estar em regiões específicas da rede, gerando uma tendência natural a distribuição de probabilidade uniforme. A distribuição torna-se, portanto, independente do valor de k .

Gráfico 10 – Simulação CQTD em rede k -regular, $q = 0$.

Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com probabilidade de encontrar a partícula.

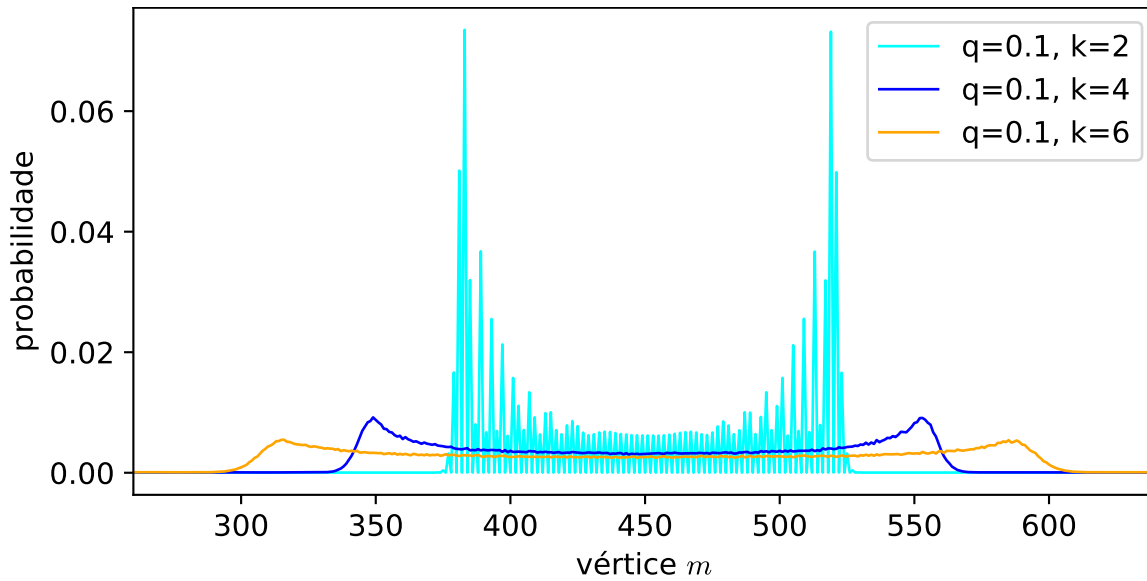
Gráfico 11 – Simulação CQTD em rede aleatória, $q = 1$.

Fonte: Autor.

Agora, analisa-se a rede pequeno mundo, avaliada para $q = 0,1; 0,5; 0,7$ e $0,9$, com os mesmos parâmetros $k = 2, 4, 6$. Para $q = 0,1; 0,5$, representados nos gráficos 12 e 13, as curvas apresentam um comportamento bem próximo da rede regular. Porém, seguindo a desigualdade 4.7, apesar de a maior probabilidade ser escolher as vizinhanças mais próximas, existem pequenas chances da partícula estar em vértices mais afastados, distribuídos quase uniformemente além dos pares de picos de maior probabilidade. Estes picos, tendem a diminuir com aumento do número de primeiros vizinhos, chegando ao caso de em $q = 0,5$ e $k = 6$, apresentar um comportamento de quase uniformidade na parte da

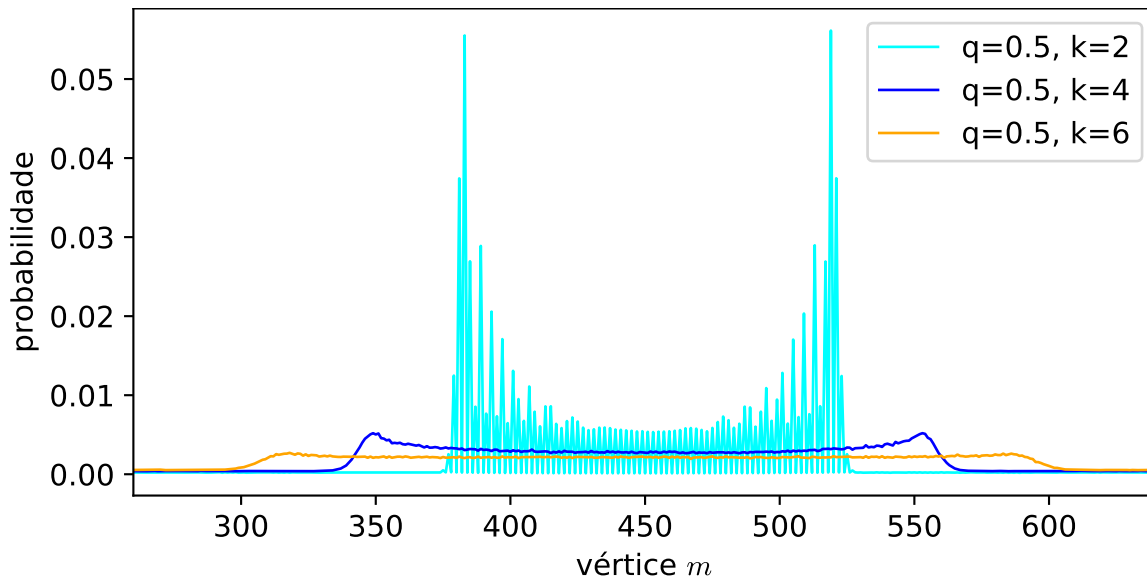
distribuição de maior probabilidade.

Gráfico 12 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $q = 0,1$.



Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com maior probabilidade de encontrar a partícula.

Gráfico 13 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $q = 0,5$.

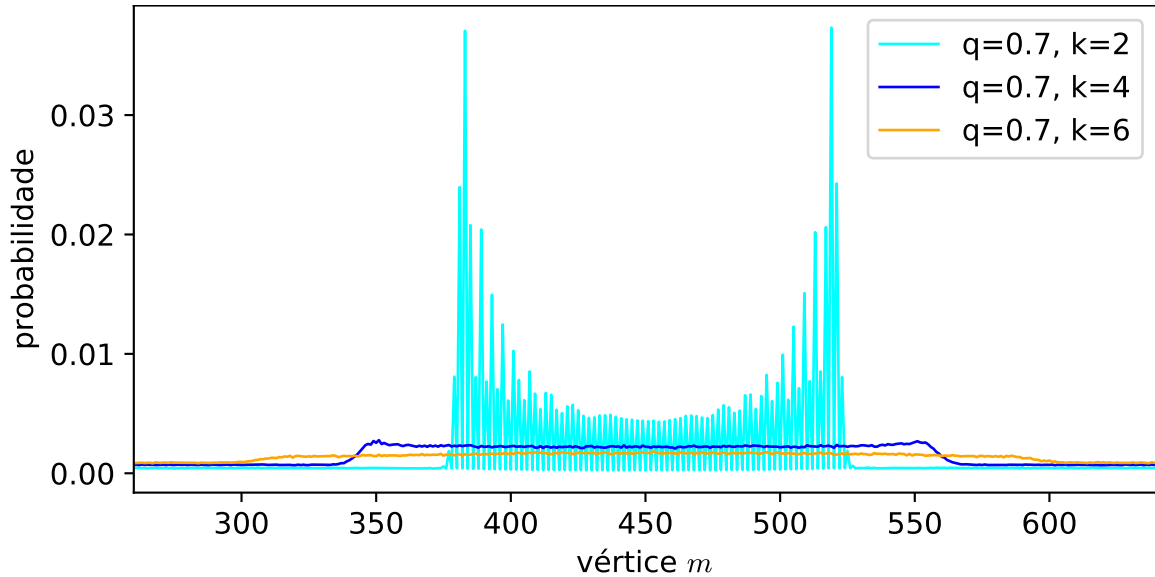


Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com maior probabilidade de encontrar a partícula.

Para $q = 0,7; 0,9$, nos gráficos 14 e 15, as curvas correspondentes a $k = 2$ são da mesma forma. Porém, é intensificado a tendencia de distribuição uniforme, para $k = 4, 6$. Comportamento demonstrado tanto pela diminuição dos pares de picos, quanto pelo aumento na distribuição de probabilidade para regiões mais distantes do ponto de origem.

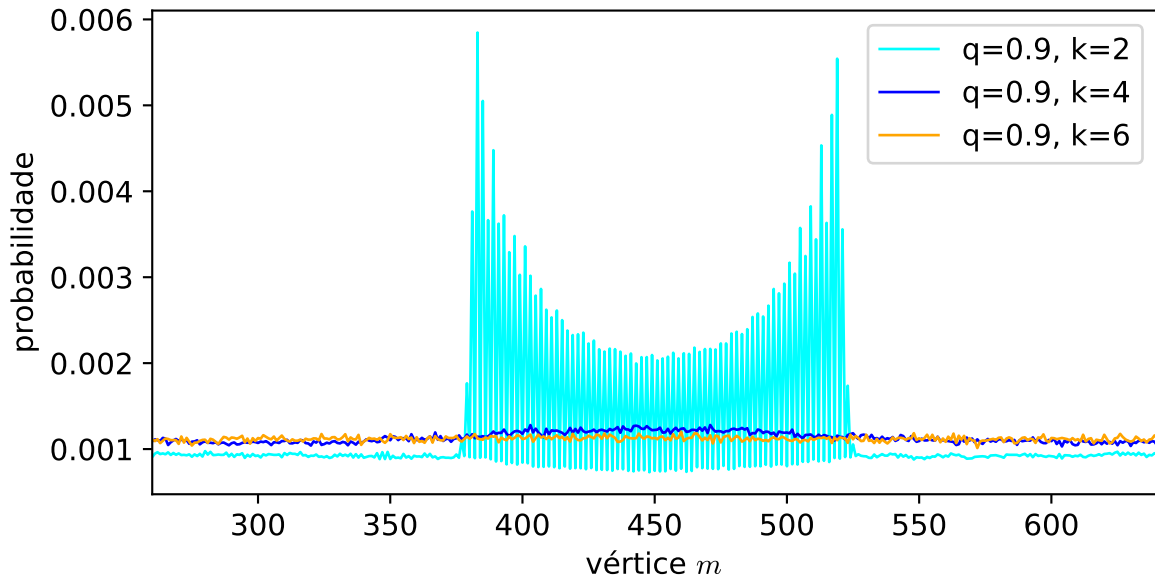
Evidencia-se $k = 6$ de $q = 0,7$ e $k = 4,6$ de $q = 0,9$, um leve pico central, semelhante a distribuição normal da caminhada aleatória clássica.

Gráfico 14 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $q = 0,7$.



Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com maior probabilidade de encontrar a partícula.

Gráfico 15 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $q = 0,9$.

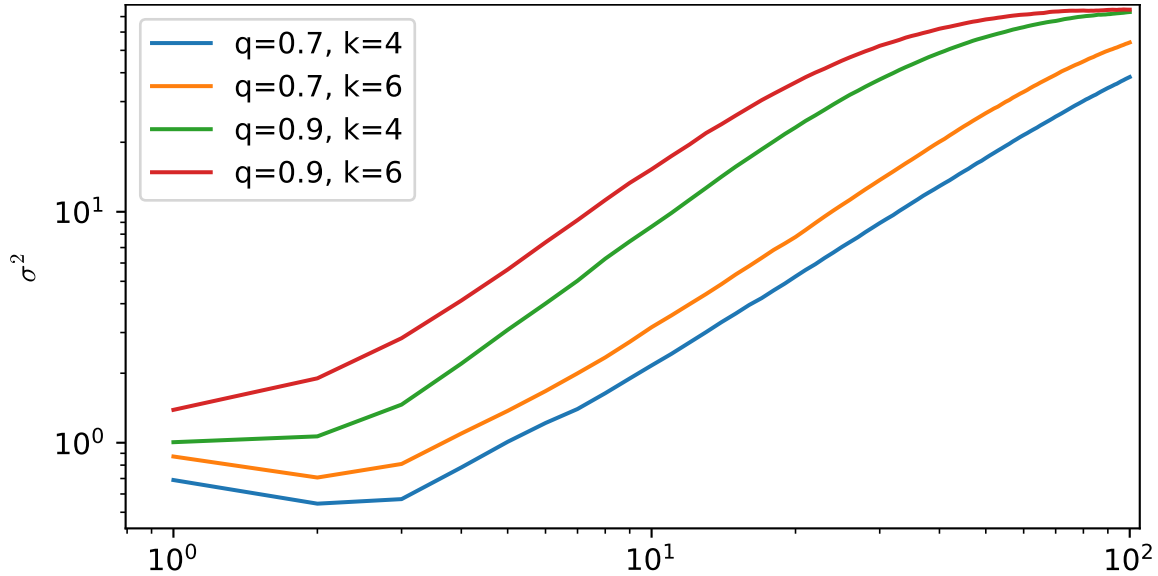


Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com maior probabilidade de encontrar a partícula.

Este comportamento motiva a analisar como ocorre o processo difusivo. Portanto, gera-se a variância das curvas $q = 0,7; 0,9$ para $k = 4, 6$, no gráfico 16. As curvas $q = 0,7$,

apresentam um comportamento diferente das $q = 0,9$, o que possivelmente indicam diferentes tipos de difusão das partículas sobre a rede.

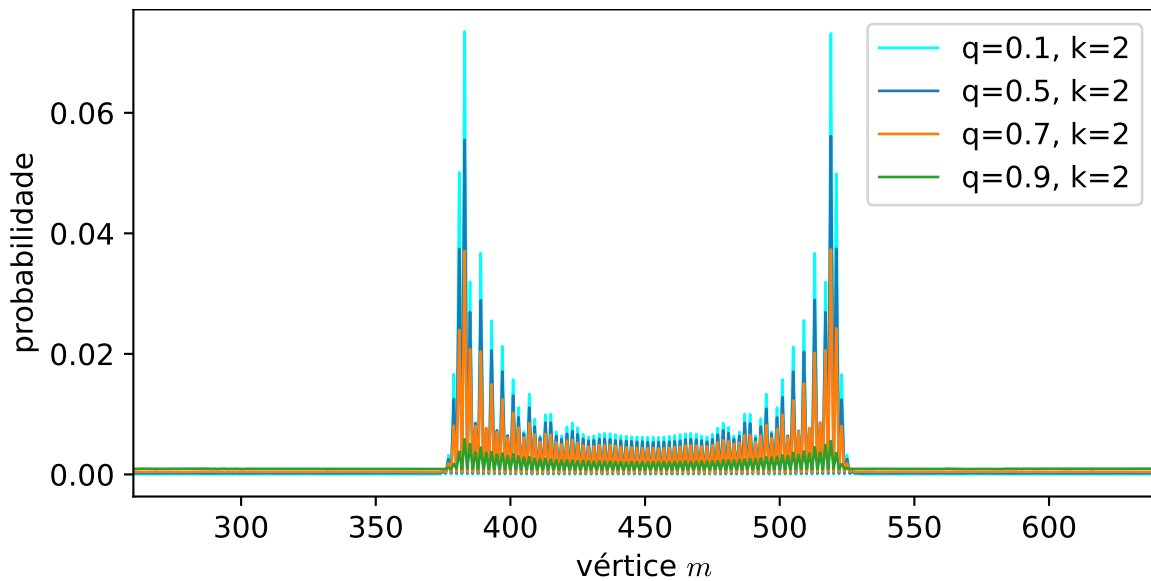
Gráfico 16 – Variância para CQTD em rede pequeno mundo, $q = 0,7; 0,9$ e $k = 4, 6$.



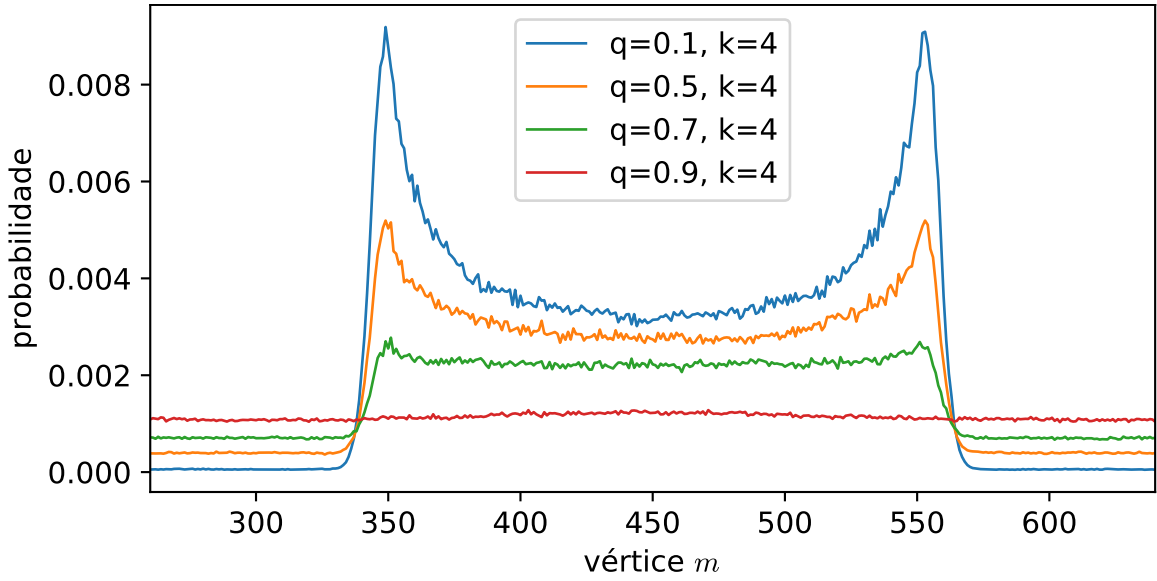
Fonte: Autor. Gráfico em escala logarítmica

Nos gráficos 17, 18 e 19, são apresentados a comparação da variação de q com k fixo. O mesmo comportamento de diminuição da região central da distribuição é visualizado, conforme o valor de q é aumentado. Porém, a modificação do comportamento torna-se bem mais nítido se comparado com a variação em função de k .

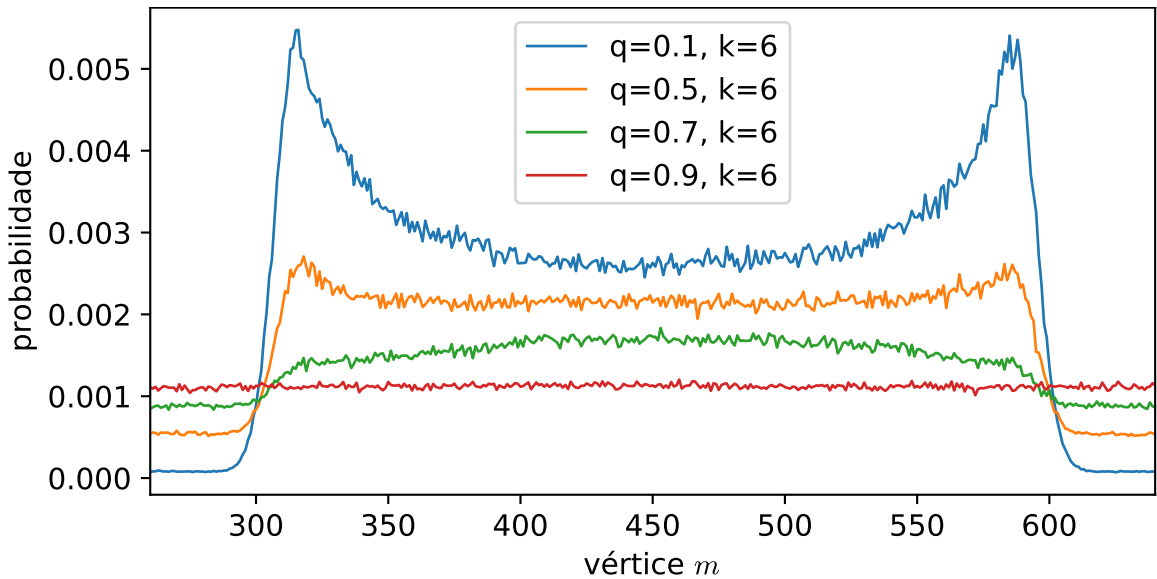
Gráfico 17 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $k = 2$.



Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com maior probabilidade de encontrar a partícula.

Gráfico 18 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $k = 4$.

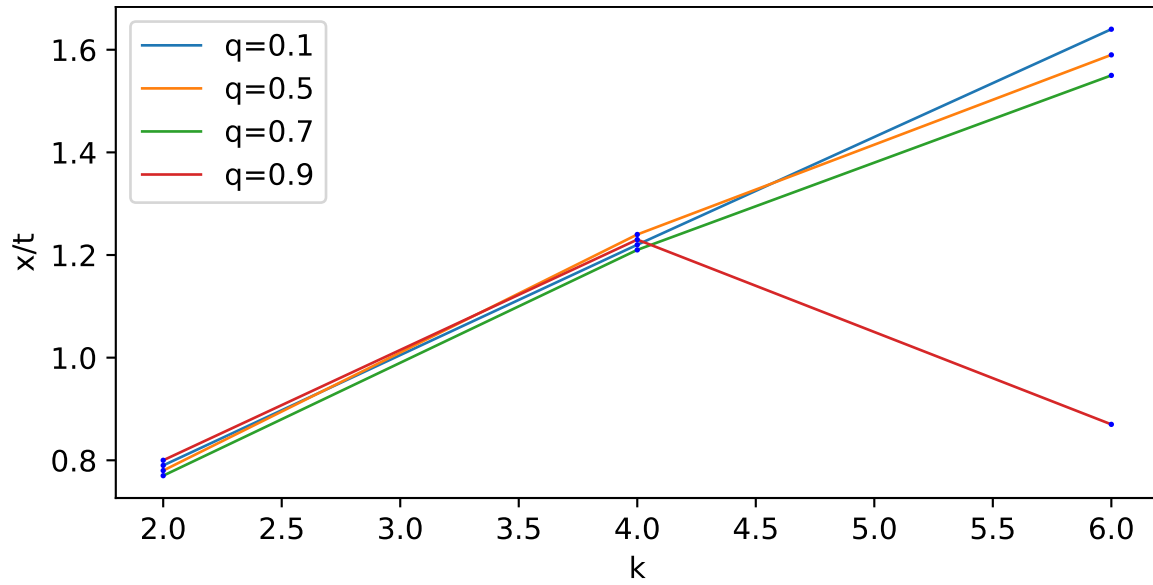
Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com maior probabilidade de encontrar a partícula.

Gráfico 19 – Simulação CQTD em rede pequeno mundo $k = 6$.

Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com maior probabilidade de encontrar a partícula.

Diante da observação da variação da distribuição de probabilidade com a evolução de k , é tentado fazer uma reescala, dessa forma colapsando os dados para encontrar alguma lei de escala resultante da variação de k . Para facilitar o processo, trocou-se a identificação de vértices por $-450 \leq x \leq 450$, onde $x \in \mathbb{Z}$. Em cada gráfico $q = 0,1; 0,5; 0,7; 0,9$, verificou-se para qual valor de $x > 0$ a região central de maior probabilidade anula-se ou normaliza-se. Os resultados são apresentados no gráfico 20.

Gráfico 20 – Análise do parâmetro de Reescala.



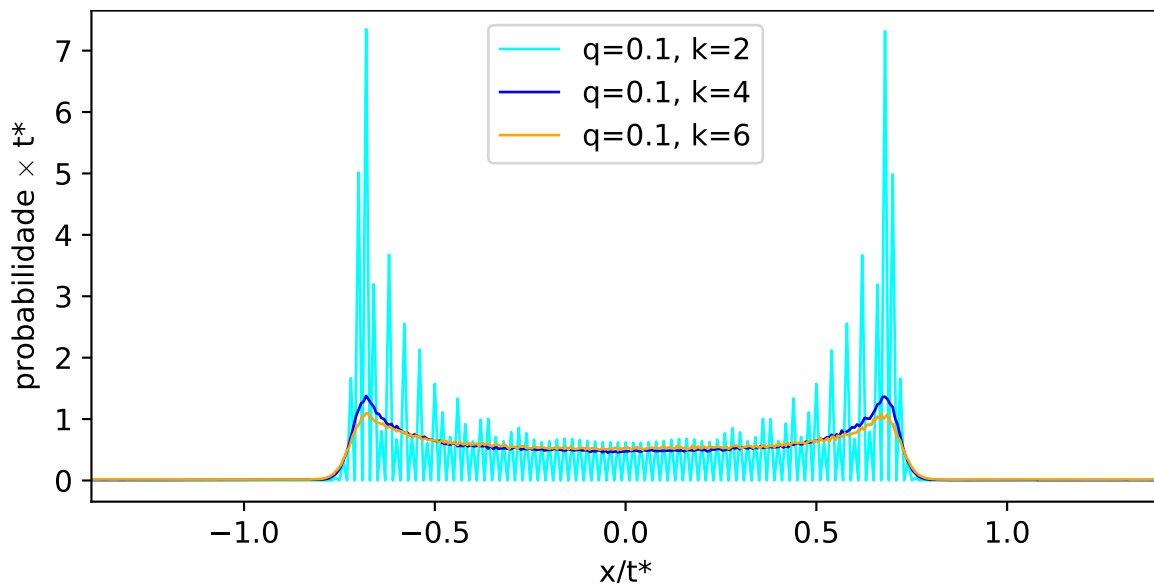
Fonte: Autor.

Então, para

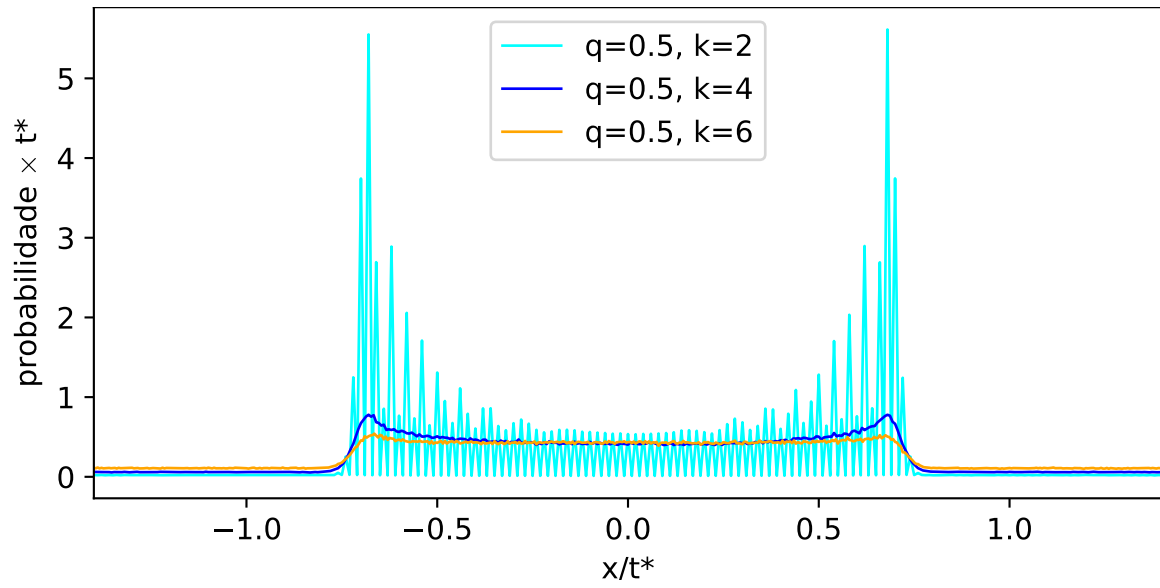
$$t^* = t \frac{k+2}{4}, \quad (4.9)$$

obtém-se os gráficos 21, 22, 23 e 24. Para $q = 0,1; 0,5$ as curvas se ajustam aproximadamente bem. Para $q = 0,7$ a curva se ajusta melhor na porção central da distribuição, enquanto que as demais partes uniformes não se colapsa. Para $q = 0,9$ a reescala falha completamente. O colapso dos dados depende da linearidade presente no gráfico 20.

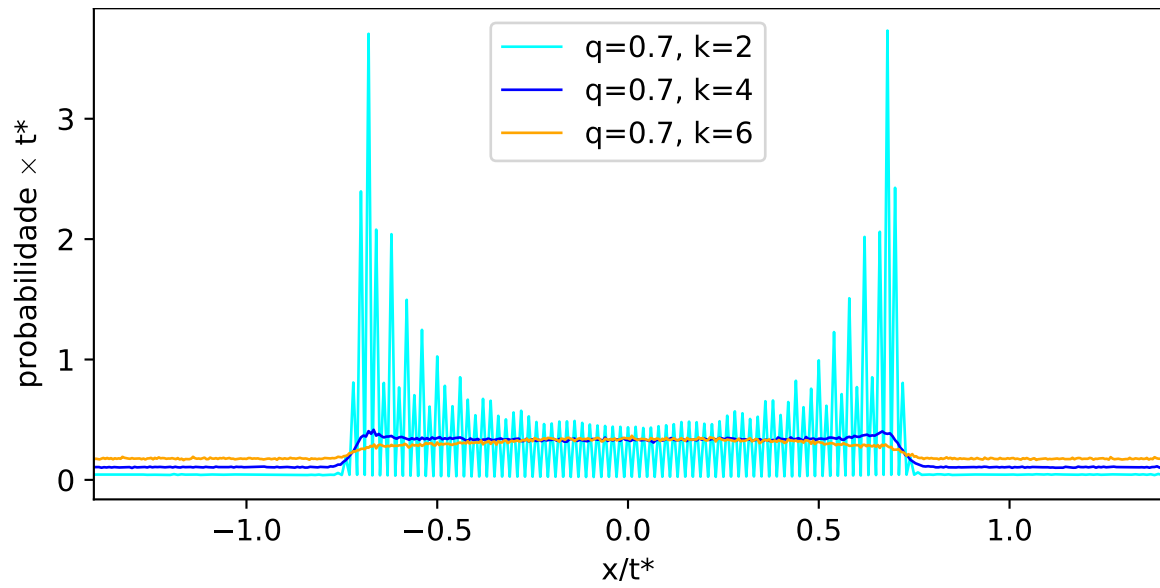
Gráfico 21 – Reescala $q = 0,1$.



Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com maior probabilidade de encontrar a partícula.

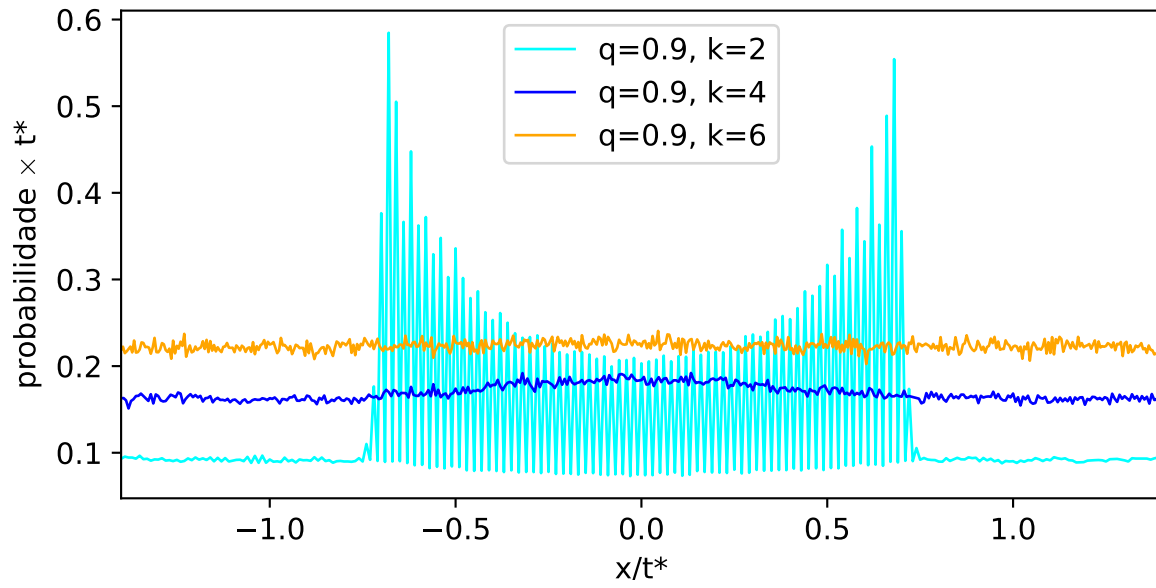
Gráfico 22 – Reescala $q = 0,5$.

Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com maior probabilidade de encontrar a partícula.

Gráfico 23 – Reescala $q = 0,7$.

Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com maior probabilidade de encontrar a partícula.

Gráfico 24 – Reescala $q = 0,9$.



Fonte: Autor. Gráfico ampliado para região com maior probabilidade de encontrar a partícula.

5 CONCLUSÕES

Neste trabalho apresentamos uma breve revisão acerca das caminhadas quânticas, diferenciando seus dois tipos, CQTC e CQTD. Apresentou-se a rede pequeno mundo e sua variante de campo médio, bem como seus espectros e CQTC sobre a mesma, ambas encontradas na literatura. Então, determinou-se o formalismo para dinâmica da caminhada quântica em tempo discreto sobre a rede pequeno mundo e apresentou-se os resultados das simulações.

O espalhamento das distribuições de probabilidade da partícula sobre a rede, aumenta de acordo com parâmetros k e q . Conforme q tende a se aproximar de 1, mais uniforme tende a ser a distribuição. Esta alteração de comportamento é consequência direta do aumento da probabilidade para migrar para os sítios da comunidade S_2 , em função da variação de q , e da expansão da comunidade S_1 , em função de k . Nota-se que estas mudanças são mais evidentes com o aumento de q .

Esta evolução na distribuição de probabilidade acusou mudanças no comportamento da variância, dessa forma, revelando diferentes processos de propagação da partícula sobre a rede, em específico no aumento de $q = 0,7$ para $q = 0,9$. A implementação de um método para classificação exata do processo difusivo para estes dois valores é um importante ponto para um trabalho futuro.

Diante da variação destas distribuições em função de k foi tentado determinar uma lei de escala que regesse este comportamento. Para $0 < q \leq 0,5$ apresentou-se um bom resultado, apesar de falhar completamente a medida que se aproxima-se de uma situação de completa aleatoriedade. Estando de acordo com o gráfico 20, que conforme q aumenta, o comportamento torna-se mais distante de uma reta.

Referências

- 1 PEARSON, K. The problem of the random walk. *Nature*, v. 72, p. 294, 1905.
- 2 DUTKA, J. On the problem of random flights. *Archive for History of Exact Sciences*, Springer, v. 32, n. 3/4, p. 351–375, 1985. ISSN 00039519, 14320657. Disponível em: <http://www.jstor.org/stable/41133753>.
- 3 PEARSON, K. The problem of the random walk. *Nature*, v. 72, p. 342, 1905.
- 4 RAYLEIGH. The problem of the random walk. *Nature*, v. 72, p. 318, 1905.
- 5 WOJNAR, R. Random walker, diffusion and wave equation. *Acta physica polonica B*, v. 44, n. 5, p. 1067–1084, 2013.
- 6 AHARONOV, Y.; DAVIDOVICH, L.; ZAGURY, N. Quantum random walks. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 48, p. 1687–1690, Aug 1993. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.48.1687>.
- 7 FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. *International journal of theoretical physics*, Springer, v. 21, n. 6, p. 467–488, 1982.
- 8 MEYER, D. A. From Quantum Cellular Automata to Quantum Lattice Gases. v. 85, p. 551–574, 1996.
- 9 FARHI, E.; GUTMANN, S. Quantum computation and decision trees. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 58, p. 915–928, Aug 1998. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.58.915>.
- 10 CHILDS, A. M. On the Relationship Between Continuous- and Discrete-Time Quantum Walk. v. 603, p. 581–603, 2010.
- 11 MOHSENI, M.; REBENTROST, P.; LLOYD, S.; ASPURU-GUZI, A. Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer. *The Journal of Chemical Physics*, v. 129, n. 17, p. 174106, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.3002335>.
- 12 BROOME, M. A.; FEDRIZZI, A.; LANYON, B. P.; KASSAL, I.; ASPURU-GUZI, A.; WHITE, A. G. Discrete single-photon quantum walks with tunable decoherence. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 104, p. 153602, Apr 2010. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.153602>.
- 13 DEUTSCH, D.; PENROSE, R. Quantum theory, the church's turing principle and the universal quantum computer. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, v. 400, n. 1818, p. 97–117, 1985. Disponível em: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1985.0070>.
- 14 SHOR, P. W. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In: *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*. [S.l.: s.n.], 1994. p. 124–134. ISSN null.

- 15 GROVER, L. K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 79, p. 325–328, Jul 1997. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.79.325>.
- 16 PAPARO G. D.; MARTIN-DELGADO, M. A. Google in a quantum network. *Scientific Reports*, 2012.
- 17 PAPARO, G. D.; MÜLLER, M.; F., C.; MARTIN-DELGADO, M. A. Quantum google in a complex network. *Scientific Reports*, n. 2773, 2013.
- 18 AERTS, D.; BIANCHI, M. Sassoli de. Do spins have directions? *Soft Computing*, v. 21, p. 1483–1504, 2015.
- 19 SAKURAI, J. J. *Modern quantum mechanics*. Revisada. [S.l.]: Addison-Wesley, 1994.
- 20 AHARONOV, D.; AMBAINIS, A.; KEMPE, J.; VAZIRANI, U. Quantum Walks on Graphs. *arXiv*, 2001.
- 21 VENEGAS-ANDRACA, S. E. Quantum walks: a comprehensive review. *Quantum Information Processing*, Springer, v. 11, n. 5, p. 1015–1106, 2012.
- 22 NAYAK, A.; VISHWANATH, A. Quantum Walk on the Line. p. 1–20, 2000. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/quant-ph/0010117>.
- 23 SHIKANO Y., W. T. . H. J. Discrete-time quantum walk with feed-forward quantum coin. *Scientific Reports*, n. 4427, 2014.
- 24 ALVES, S. B.; de Oliveira, G. F.; de Oliveira, L. C.; Passerat de Silans, T.; CHEVROLLIER, M.; ORIÁ, M.; de S. Cavalcante, H. L. Characterization of diffusion processes: Normal and anomalous regimes. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 447, p. 392–401, 2016. ISSN 0378-4371. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437115010778>.
- 25 J, D. P. *Circulant matrices*. [S.l.]: A Wiley-Interscience publication, 1979. ISBN 0-471-05771-1.
- 26 GRADSHTEYN, I. S.; RYZHIK, I. M. *Table of integrals, series, and products*. 7. ed. [S.l.]: Academic press, 2007.
- 27 GRABOW, C.; GROSSKINSKY, S.; TIMME, M. Small-world network spectra in mean-field theory. *Physical review letters*, APS, v. 108, n. 21, p. 218701, 2012.
- 28 MILGRAM, S. The small world problem. *Psychology today*, New York, v. 2, n. 1, p. 60–67, 1967.
- 29 WATTS, D. J.; STROGATZ, S. H. Collective dynamics of ‘small-world’ networks. v. 393, p. 440–442, 1998.
- 30 KAWAI, Y.; PARK, J.; ASADA, M. A small-world topology enhances the echo state property and signal propagation in reservoir computing. *Neural Networks*, v. 112, p. 15 – 23, 2019. ISSN 0893-6080. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0893608019300115>.

- 31 BASSETT, D. S.; BULLMORE, E. T. Small-world brain networks revisited. *The Neuroscientist*, v. 23, n. 5, p. 499–516, 2017. PMID: 27655008. Disponível em: <https://doi.org/10.1177/1073858416667720>.
- 32 LATORA V.; MARCHIORI, M. Economic small-world behavior in weighted networks. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 2003.
- 33 SEATON, K. A.; HACKETT, L. M. Stations, trains and small-world networks. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 339, n. 3, p. 635 – 644, 2004. ISSN 0378-4371. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437104003036>.
- 34 WATTS, D. J. *Small worlds: the dynamics of networks between order and randomness*. [S.l.]: Princeton university press, 1999.
- 35 NEWMAN, M. E. Models of the small world. *Journal of Statistical Physics*, Springer, v. 101, n. 3-4, p. 819–841, 2000.
- 36 BOCCALETTI, S.; LATORA, V.; MORENO, Y.; CHAVEZ, M.; HWANG, D.-U. Complex networks: Structure and dynamics. *Physics Reports*, v. 424, n. 4, p. 175 – 308, 2006. ISSN 0370-1573. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037015730500462X>.
- 37 SOUZA, A. M. C.; ANDRADE, R. F. S. Fast and slow dynamics for classical and quantum walks on mean-field small world networks. 2019.
- 38 MOLITIERNO, J. J. *Applications of combinatorial matrix theory to Laplacian matrices of graphs*. [S.l.]: Chapman and Hall/CRC, 2016.
- 39 MÜLKEN, O.; BLUMEN, A. Spacetime structures of continuous-time quantum walks. n. November 2004, p. 1–5, 2005.
- 40 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, feb 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/1751-8113/42/11/115205>.
- 41 SOUZA, A.; ANDRADE, R. Fast and slow dynamics for classical and quantum walks on mean-field small world networks. *Scientific Reports*, n. 19143, 2019.
- 42 SALINAS, S. R. A. *Introdução a física estatística*. 2. ed. [S.l.]: edusp, 2008.
- 43 HAZZAN, S. *Fundamentos de matemática elementar: combinatória, probabilidade*. 3. ed. [S.l.]: Atual, 1977.

APÊNDICE A – OPERADOR TRANSLAÇÃO

Dada a função de onda $\psi(x)$, a correspondente função transladada a l unidades, $\psi(x - l)$, é dada por

$$\psi(x - l) = \hat{T}(l)\psi(x), \quad (\text{A.1})$$

onde $\hat{T}(l)$ é o operador translação, a ser definido.

Assumindo o parâmetro l como uma variável contínua, a relação entre as duas funções pode ser feita pela expansão de taylor (26)

$$\psi(x - l) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n}{dl^n} \psi(x - l) \Big|_{l=0} l^n. \quad (\text{A.2})$$

Definindo $u = u(l)$, tal que, $u(l) = x - l$, aplica-se algumas vezes a regra da cadeia que leva a assumir como verdade:

$$\frac{d^k}{dl^k} \psi(x - l) = (-1)^k \frac{d^k}{du^k} \psi(u), \quad (\text{A.3})$$

para $k \geq 0$. Observa-se que o resultado acima independe da variável l . Sentença que é confirmada para $k + 1$:

$$\frac{d^{k+1}}{dl^{k+1}} \psi(x - l) = \frac{d}{dl} \left(\frac{d^k}{dl^k} \psi(x - l) \right) \quad (\text{A.4})$$

$$= \frac{d}{dl} \left((-1)^k \frac{d^k}{du^k} \psi(u) \right) \quad (\text{A.5})$$

$$= (-1)^{k+1} \frac{d^{k+1}}{du^{k+1}} \psi(u). \quad (\text{A.6})$$

Portanto, por indução:

$$\frac{d^n}{dl^n} \psi(x - l) \Big|_{l=0} = (-1)^n \frac{d^n}{du^n} \psi(u), \quad (\text{A.7})$$

para todo $n \geq 0$.

Uma vez que $\psi(u) = \psi(x)$, para $u = x$, temos que:

$$\psi(x - l) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-l)^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} \psi(x). \quad (\text{A.8})$$

Por outro lado, sabe-se que a taxa de variação infinitesimal da função de onda está relacionada ao operador momento (19):

$$\hat{P} = -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (\text{A.9})$$

Isso permite escrever a equação A.11 da seguinte forma

$$\psi(x-l) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-il\hat{P}}{\hbar} \right)^n \psi(x). \quad (\text{A.10})$$

Sendo

$$\exp\left(\frac{-il\hat{P}}{\hbar}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-il\hat{P}}{\hbar} \right)^n, \quad (\text{A.11})$$

obtém-se

$$\psi(x-l) = \exp\left(\frac{-il\hat{P}}{\hbar}\right) \psi(x), \quad (\text{A.12})$$

logo, o operador de translação é dado por

$$\hat{T}(l) = \exp\left(\frac{-il\hat{P}}{\hbar}\right). \quad (\text{A.13})$$

Realizando o mesmo processo anterior, tem-se que

$$\psi(x+l) = \exp\left(\frac{il\hat{P}}{\hbar}\right) \psi(x), \quad (\text{A.14})$$

tal que, tendo o conjugado hermitiano de $(-i\hat{P}^k)^{\dagger} = i\hat{P}^k$, pela equação A.11:

$$\hat{T}^{\dagger}(l) = \hat{T}(-l) = \exp\left(\frac{il\hat{P}}{\hbar}\right). \quad (\text{A.15})$$

De A.13 e A.15

$$\hat{T}(l)\hat{T}^{\dagger}(l) = \hat{I}, \quad (\text{A.16})$$

logo, a inversa de operador translação é seu conjugado hermitiano

$$\hat{T}^{-1} = \hat{T}^{\dagger}. \quad (\text{A.17})$$

Outras propriedades são:

$$\hat{T}(l)\hat{T}(l') = \exp\left[\frac{-i(l+l')\hat{P}}{\hbar}\right] = \hat{T}(l+l'), \quad (\text{A.18})$$

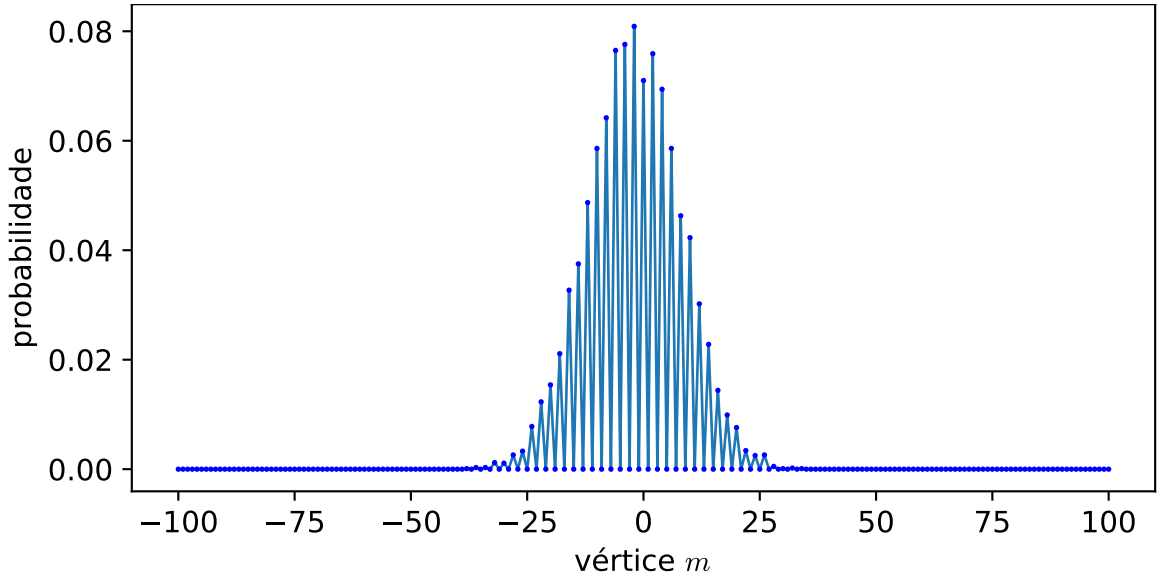
$$\hat{T}(0) = \hat{I} \quad (\text{A.19})$$

onde a equação A.18 mostra que duas translações sucessivas equivale a uma única translação. A equação A.19, revela a redução do operador a uma identidade.

APÊNDICE B – Caminho aleatório clássico unidimensional

O problema do caminho aleatório clássico unidimensional é tratado aqui como a dinâmica de uma partícula clássica em uma dimensão. Seu movimento consiste em deslocamentos para direita com probabilidade p_d , ou esquerda com $p_e = 1 - p_d$, fixados a comprimento l . Esses deslocamentos são também denominados de passos (42). O objetivo do problema é encontrar a probabilidade da partícula está no ponto x , ao longo da direção $\vec{x}$. O gráfico 25 mostra uma simulação dessa dinâmica.

Gráfico 25 – Simulação do caminho aleatório clássico.



Fonte: Autor. Distribuição de probabilidade discreta da posição final de uma simulação de 10000 partículas realizando 100 passos aleatórios clássicos de comprimento $l = 1$, com $p_e = 50\%$.

O desenvolvimento da solução analítica segue a referência (42). Em uma dada sequência de N passos, a partícula pode realizar N_e para esquerda e $N_d = N - N_e$ para direita. A escolha de um desses sentidos, em um passo, não afeta os próximos. Portanto, o produto (43)

$$p_d^{N_d} p_e^{N_e} \quad (\text{B.1})$$

é a probabilidade de obter a sequência. Cada permutação na ordem em que estão distribuídos os sentidos dos passos é gerado a uma sequência diferente, porém, com a mesma probabilidade. Logo, no total, existem

$$\frac{N!}{N_e! N_d!} \quad (\text{B.2})$$

sequências possíveis de serem realizadas. Uma vez que são mutualmente exclusivos (43) a probabilidade total é dada pela distribuição binomial:

$$P_N(N_d) = \frac{N!}{N_e!N_d!} p_d^{N_d} p_e^{N_e}. \quad (\text{B.3})$$

Sendo os passos discretos, a posição final x pode ser escrita como $x = ml$, onde $m = N_d - N_e$. Logo, reescreve-se B.3 em função de m e N , e

$$P_N(m) = \frac{N!}{\left(\frac{N+m}{2}\right)! \left(\frac{N-m}{2}\right)!} p_d^{\frac{N+m}{2}} (1 - p_d)^{\frac{N-m}{2}} \quad (\text{B.4})$$

é a probabilidade da partícula está em $x = ml$.

É possível ainda definir uma relação de recorrência, que torna possível, por exemplo, a extensão para um problema tridimensional. Continuando com o desenvolvimento de (42), considera-se que cada passo é dado em um intervalo de tempo τ . Portanto, $P_N(m)$ passa a ser a probabilidade da partícula está em x no tempo $t = N\tau$. Dessa forma, as chances da partícula migrar para $x = ml$ em $t = (N + 1)\tau$ são: no tempo $t = N\tau$, está na posição $x = (m - 1)l$ e dá um passo para direita ou na posição $x = (m + 1)l$ com um passo para esquerda. Consequentemente, a relação é dada por:

$$P_{N+1}(m) = p_d P_N(m - 1) + p_e P_N(m + 1). \quad (\text{B.5})$$

A equação B.4 satisfaz esta relação. Em (42) encontra-se, em um caso particular, a representação contínua desta equação, ao tomar τ e l muito pequenos. Como resultado, é obtido a equação diferencial da difusão.

APÊNDICE C – Análise de Fourier do Caminhante de Hadamard

Dada a transformada de Fourier

$$\tilde{\Psi}(k, t) = \sum_m \Psi(m, t) e^{ikm}, \quad (\text{C.1})$$

onde, $k \in [-\pi, \pi]$, sua inversa é dada por

$$\Psi(m, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{\Psi}(k, t) e^{-ikm} dk. \quad (\text{C.2})$$

Aplicando a transformada na equação 2.19,

$$\tilde{\Psi}(k, t+1) = \sum_m (M_+ \Psi(m-1, t) + M_- \Psi(m+1, t)) e^{ikm}, \quad (\text{C.3})$$

e tendo que

$$\sum_m \Psi(m-1, t) e^{ikm} = e^{ik} \tilde{\Psi}(k, t), \quad (\text{C.4})$$

$$\sum_m \Psi(m+1, t) e^{ikm} = e^{-ik} \tilde{\Psi}(k, t), \quad (\text{C.5})$$

é obtido:

$$\tilde{\Psi}(k, t+1) = (e^{ik} M_+ + e^{-ik} M_-) \tilde{\Psi}(k, t) \quad (\text{C.6})$$

$$= M_k \tilde{\Psi}(k, t), \quad (\text{C.7})$$

onde,

$$M_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{ik} & e^{ik} \\ e^{-ik} & -e^{-ik} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.8})$$

Os autovalores de M_k são obtidos pelo determinante:

$$\left| \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{ik} & e^{ik} \\ e^{-ik} & -e^{-ik} \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right| = \left(\lambda - \frac{isen(k)}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{sen^2(k)}{2} - 1 = 0, \quad (\text{C.9})$$

logo, as soluções são $\lambda_1 = e^{iw_k}$ e $\lambda_2 = -e^{-iw_k}$, onde $sen(w_k) = \frac{sen(k)}{\sqrt{2}}$, tal que, $w_k \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$. Com a equação de autovetores e autovalores,

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{ik} & e^{ik} \\ e^{-ik} & -e^{-ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.10})$$

obtém-se as componentes dos correspondentes autovetores, c_1 e c_2 . Para $\lambda_1 = e^{iw_k}$, tem-se a relação

$$c_2 = c_1 e^{-ik} (\sqrt{2} e^{iw_k} - e^{ik}), \quad (\text{C.11})$$

tal que normalizando,

$$|c_1| = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \cos^2(k) - \cos(k) \sqrt{1 + \cos^2(k)} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{C.12})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\cos(k)}{\sqrt{1 + \cos^2(k)}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{C.13})$$

Portanto, escolhe-se o seguinte autovetor

$$\phi_1(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\cos(k)}{\sqrt{1 + \cos^2(k)}} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} e^{ik} \\ \sqrt{2}e^{iw_k} - e^{ik} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.14})$$

Para $\lambda_2 = -e^{-iw_k}$,

$$c_2 = -c_1 e^{-ik} \left(\sqrt{2}e^{-iw_k} + e^{ik} \right), \quad (\text{C.15})$$

onde,

$$|c_1| = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\cos(k)}{\sqrt{1 + \cos^2(k)}} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{C.16})$$

Logo, escolhe-se

$$\phi_2(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\cos(k)}{\sqrt{1 + \cos^2(k)}} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} e^{ik} \\ -\sqrt{2}e^{-iw_k} - e^{ik} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.17})$$

A partir da equação C.7, e dado o estado inicial $\tilde{\Psi}(k, 0)$, a dinâmica após t passos é dada por:

$$\tilde{\Psi}(k, t) = (M_k)^t \tilde{\Psi}(k, 0). \quad (\text{C.18})$$

Uma vez conhecido os autovetores e autovalores de M_k , temos que

$$(M_k)^t = A D^t A^{-1}, \quad (\text{C.19})$$

onde:

$$A = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\cos(k)}{\sqrt{1 + \cos^2(k)}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{ik} & \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\cos(k)}{\sqrt{1 + \cos^2(k)}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{ik} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\cos(k)}{\sqrt{1 + \cos^2(k)}} \right)^{\frac{1}{2}} (\sqrt{2}e^{iw_k} - e^{ik}) & \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\cos(k)}{\sqrt{1 + \cos^2(k)}} \right)^{\frac{1}{2}} (-\sqrt{2}e^{-iw_k} - e^{ik}) \end{pmatrix}, \quad (\text{C.20})$$

$$D^t = \begin{pmatrix} e^{iw_k t} & 0 \\ 0 & (-1)^t e^{-iw_k t} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.21})$$

Então, para o estado inicial $\tilde{\Psi}(k, 0) = (1, 0)^T$ (transformada de Fourier de 2.20), a transformada de Fourier da função de onda é:

$$\tilde{\Psi}(k, t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\cos k}{\sqrt{1 + \cos^2 k}} \right) e^{iw_k t} + \frac{(-1)^t}{2} \left(1 - \frac{\cos k}{\sqrt{1 + \cos^2 k}} \right) e^{-iw_k t} \\ \frac{e^{-ik}}{2\sqrt{1 + \cos^2 k}} (e^{iw_k t} - (-1)^t e^{-iw_k t}) \end{pmatrix}. \quad (\text{C.22})$$

A solução $\Psi(m, t) = (\psi_+(m, t), \psi_-(m, t))^T$, é obtida pela inversa da transformada de Fourier das componentes de C.22:

$$\psi_+(m, t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\cos k}{\sqrt{1 + \cos^2 k}} \right) e^{iw_k t} e^{-ikm} + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{(-1)^t}{2} \left(1 - \frac{\cos k}{\sqrt{1 + \cos^2 k}} \right) e^{-iw_k t} e^{-ikm}, \quad (\text{C.23})$$

$$\psi_-(m, t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{-ik}}{2\sqrt{1 + \cos^2 k}} e^{iw_k t} e^{-ikm} - \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{(-1)^t e^{-ik}}{2\sqrt{1 + \cos^2 k}} e^{-iw_k t} e^{-ikm}. \quad (\text{C.24})$$

É possível reescrever a segunda integral das equações acima seguindo o procedimento: reescrever o integrando utilizando as propriedades $\sin(\theta \pm n\pi) = (-1)^n \sin(\theta)$ e $\cos(\theta \pm n\pi) = (-1)^n \cos(\theta)$; realizar uma mudança de variável $k \rightarrow k + \pi$; usar o fato do integrando ser uma função periódica, com período 2π , onde os valores da função no intervalo $[\pi, 2\pi]$ são iguais ao do $[-\pi, 0]$. Dessa forma:

$$\psi_+(m, t) = \frac{1 + (-1)^{t+n}}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \left(1 + \frac{\cos k}{\sqrt{1 + \cos^2 k}} \right) e^{iw_k t} e^{-ikm}, \quad (\text{C.25})$$

$$\psi_-(m, t) = \frac{1 + (-1)^{t+n}}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{e^{-ik}}{\sqrt{1 + \cos^2 k}} e^{iw_k t} e^{-ikm}. \quad (\text{C.26})$$

APÊNDICE D – INVERSA DOS AUTOVETORES DA MATRIZ CIRCULANTE

Dado os autovetores pela equação 2.26 da seção 2.2, escreve-se a seguinte combinação linear:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi nl}{N}} |\phi_n\rangle, \quad (\text{D.1})$$

tal que,

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi nl}{N}} |\phi_n\rangle = \sum_{m=1}^N \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi[l-(m-1)]n}{N}} |m\rangle. \quad (\text{D.2})$$

Uma vez que

$$\delta_{(m-1),l} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi[l-(m-1)]n}{N}}, \quad (\text{D.3})$$

é a delta de Kronecker,

$$\delta_{(m-1),l} = \begin{cases} 1 & \text{se } m-1 = l, \\ 0 & \text{se } m-1 \neq l. \end{cases} \quad (\text{D.4})$$

Então da equação D.2,

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi nl}{N}} |\phi_n\rangle = \sum_{m=1}^N \delta_{(m-1),l} |m\rangle \quad (\text{D.5})$$

$$= |l+1\rangle. \quad (\text{D.6})$$

Fazendo uma mudança $l \rightarrow l-1$

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi n(l-1)}{N}} |\phi_n\rangle, \quad (\text{D.7})$$

logo, obtendo a equação 2.29.