

Laboratório Nacional de Computação Científica  
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional

# **Caminhada Quântica Escalonada em Grade Hexagonal**

Bruno de Oliveira Chagas

Petrópolis, RJ - Brasil

Dezembro de 2018

Bruno de Oliveira Chagas

## **Caminhada Quântica Escalonada em Grade Hexagonal**

Tese submetida ao corpo docente do Laboratório Nacional de Computação Científica como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências em Modelagem Computacional.

Laboratório Nacional de Computação Científica  
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional

Orientador: Renato Portugal

Petrópolis, RJ - Brasil

Dezembro de 2018

XXXX Chagas, Bruno de Oliveira  
Caminhada Quântica Escalonada  
em Grade Hexagonal / Bruno de Oliveira Chagas. – Petrópolis, RJ - Brasil, Dezembro  
de 2018-  
83 p. : il. ; 30 cm.

Orientador(es): Renato Portugal e

Tese (D.Sc.) – Laboratório Nacional de Computação Científica  
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, Dezembro de 2018.

1. Caminhada Quântica Escalonada. 2. Grade Hexagonal. 2. Problema de Busca.  
I. Portugal, Renato. II. LNCC/MCTI. III. Título

CDD: XXX.XXX

Bruno de Oliveira Chagas

## **Caminhada Quântica Escalonada em Grade Hexagonal**

Tese submetida ao corpo docente do Laboratório Nacional de Computação Científica como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências em Modelagem Computacional.

Aprovada por:

---

**Prof. Renato Portugal, D.Sc.  
(Presidente)**

---

**Prof. Carlile Campos Lavor, D.Sc.**

---

**Prof. Franklin de Lima Marquezino, D. Sc.**

---

**Prof. Paulo César Marques Vieira, D. Sc.**

---

**Prof. Artur Ziviani, D. Sc.**

Petrópolis, RJ - Brasil  
Dezembro de 2018

## **Dedicatória**

*Agradeço de forma unitária e sem medição aos amigos:*

$\frac{1}{\sqrt{5}}$  ( $|Chagas\rangle + |Rodrigues\rangle + |Fernandes\rangle + |Judice\rangle + |Leão\rangle$ )

# Agradecimentos

1.

a ordem que as pessoas aparecem não necessariamente tem a ver com a importância delas nessa tese, apenas com a forma como quero contar essa história – bem anacrônico mesmo e minha cabeça funciona assim.

2.

não me recordo exatamente do dia que cheguei no laboratório. acho que tinha sol, me lembro vagamente disso. sei também que eu e caio viemos para a matrícula do doutorado e aaron nos ajudou a ver apartamentos no bnh. e que se faça justiça desde aqui: caio é, definitivamente, cláusula pétrea, a pessoa que mais tenho carinho fora do ambiente familiar. nós fizemos graduação, mestrado e doutorado juntos; se isso não é um casamento, eu já não sei mais. para quem não sabe: no cartaz de defesa do caio colocaram meu sobrenome no dele. ainda bem que os problemas de memória na velhice não atingem tanto o córtex, mais o hipocampo: assim vou poder lembrar desses momentos de amizade e lembrar de todas as baixarias que passamos. e daqui pra frente nós significa eu e caio, e não esse sujeito misterioso que aparece em textos científicos.

3.

o mais engraçado é que conhecemos o aaron na prova de seleção. nós estávamos em uma pousada aqui perto e ficamos estudando numa das mesas. a prova de métodos numéricos foi a mais difícil e aaron veio perguntar como fomos, dissemos que *suave*. ele ficou puto porque pensou que éramos da computação e não da matemática. depois disso nós três estudamos pra prova de modelagem do outro dia. foi aaron quem ajudou a ver onde iríamos morar, e o primeiro foi o que ficou: apartamento 402 no bloco 9.

não vim para trabalhar com computação quântica aqui. minha pesquisa do mestrado na uff de volta redonda foi em métodos numéricos. vim para cá pra continuar isso e trabalhar com o abimael loula – aqui eu abro um espaço a parte para dizer o quanto eu gosto dele, mesmo que ele não saiba: ele nos recebeu no encontro do laboratório em 2012, esteve na minha banca de mestrado, sempre prestativo a entender e tudo *muchobom*.

a minha mudança para computação quântica foi em uma disciplina do renato portugal, meu então orientador, em fundamentos de computação. a metade da disciplina foi bastante teórica, seguindo os moldes de uma disciplina clássica, e a segunda metade seminários sobre temas específicos – a propósito, foi uma das melhores disciplinas que cursei e recomendo. um dos temas era computação quântica, e eu pensei que seria uma boa: o professor é da área específica, o aaron está nela, estou obcecado com a disciplina. fiz minha apresentação,

nota máxima e tudo ficou revirado.

aaron foi quem deu aquela hookada do pudge ir pra computação quântica. e reconheço que foi uma das melhores escolhas que fiz, não sei se eu teria tanto gosto por métodos numéricos ao fim do doutorado. e não posso deixar de agradecer pelo aaron ser um irmão, sem exageros de afetação, que me ajudou, que brigou comigo, que riu e chorou comigo. essa casca dura de pequí goiano tem um lado muito gentil. quatro letras e dois números fields forever. ah, quiéta.

4.

aaron já tinha cursado a primeira disciplina de computação quântica e eu entrei na segunda disciplina. tive que correr à usain bolt pra pegar muita coisa, mas muita coisa foi retomada. nessa disciplina que conheci o tharso e que junto do aaron foi o trio de estudo e pesquisa. estudamos diversas noites pra tentar cumprir as listas propostas. depois de muitos exercícios agarrados, esbravejar com nielsen e chuang por deixar resultados importantes como exercício, tharso se tornou mais que companheiro de disciplina, se tornou um amigo que me ajudou muito e devo parte da minha tese. eu tive momentos de não querer sair de casa, e que a depressão seja enunciada aqui, ele quem me chamava pra trabalhar e terminar a tese. a cara do tharso ficando bravo é a melhor que tem.

nesse período de disciplinas, e muito antes até, eis que surge sicilia ferreira ponce pasini judice – sempre quis escrever esse nome completo. ela foi a namorada do aaron e, de quebra, das pessoas ao redor – sem constrangimento de ser feliz. são tantos fatos felizes e tristes a se lembrar: quando ficávamos fazendo disciplina e ela preparava ou se preocupava com que iríamos comer; quando estávamos tristes e papeávamos na entrada do apartamento; quando ela lembra de mim quando vê o nome svetlana; quando lembramos um do outro e queremos saber como tudo tá; quando a gente descobre um livro e quer que o outro leia porque vai ficar tudo bem, e está ficando. sicilia – a.k.a. secis – acompanhou tudo que passei durante esse doutorado, sofreu comigo, e vai ficar ainda mais feliz com o título. cresci a aprendi muito com ela. boa, secis!

5.

a quântica me deu ótimas experiências acadêmicas e de vida. quero muito agradecer ao meu orientador que me ajudou nessa pesquisa. as primeiras tentativas de tese foram um total fracasso e só depois ganhou corpo: tentamos otimização multiobjetivo por algoritmos quânticos, fomos para o algoritmo quântico de otimização aproximada, só depois em caminhadas quânticas e que compõem essa tese. e isso associado a uma depressão não foi uma experiência muito boa, digamos assim. quando disse que eu precisava de ajuda eu tive ajuda do renato e todo o acolhimento. devo muito da minha tese ao conhecimento dele da área, o cuidado com a pesquisa e como tive apoio nesse momento tão delicado. meu mais efusivo agradecimento por me orientar nessa tese.

não posso deixar de agradecer abuzer yakaryilmaz, alexander rivosh e luís tarrataca, todos da computação quântica. abuzer que fez a minha ida até a letônia possível, alexander por se disponibilizar a comprar as passagens. luís foi quem me hospedou lá, cedendo um espaço de onde ele ficou, me levando numa trilha em sigulda e sendo um ótimo amigo, tanto lá, quanto aqui.

6.

acho que agora já pode falar da família. vão acabar pensando que sou um-sem-mãe-e-pai. meu pai tem o ensino fundamental incompleto, trabalha como alfaiate, dia e noite, sete dias por semana. minha mãe teve até o ensino médio e o ensino superior negado pela mãe. e não muito atrás, sei que minha bisavó era escrava e vivia em um quilombo. então eu sei que tenho uma dívida com eles por essa história, as condições financeiras ajudam muito, mas o afeto é o que me trouxe aqui. agradeço meus pais porque eu cheguei aqui – é por mim, é por eles. meu irmão é um caso a parte. parágrafo.

sempre que eu viajava meu irmão adoecia. quando vim para petrópolis ele ficou doente por dias. a diferença de idade é de dois anos e seis meses apenas, então tivemos como compartilhar muita coisa. eu e ele temos uma conexão muito especial, nada sobrenatural, talvez o fenômeno dos fótons gêmeos, e que foi nutrida ao longo de muitos anos. tenho imenso orgulho do que ele já alcançou, do tanto que ele me ajudou ao longo dos anos, das muitas conversas, dos perrengues da vida, dos shows que fomos. bibi, essa tese é pra você também.

7.

pelo quase fim do doutorado eu fiz um concurso, passei, mas por certos problemas eu não pude assumir o cargo. eu fiquei muito triste na época, muito mal, e isso agravou mais minha depressão. lembro que meu amigo marcel, e fica aqui o agradecimento, me ajudou a repensar e colocar a cabeça no lugar; e ele fez ao longo de outros anos também. passaram-se os anos e eu fiz um concurso para substituto na uff de petrópolis mesmo e passei.

esses últimos dois anos foram os mais felizes da minha vida. acredito piamente que estar dentro da uff ensinando, convivendo com alunos, me ajudou muito a superar tudo que aconteceu de ruim. confesso que eu nunca quis ser pesquisador, desde a quinta série eu ensinava matemática e na oitava decidi ser professor. dar aulas foi a serotonina que faltava. obrigado aos professores aníbal, moacyr e duque por acreditarem no meu trabalho. agradeço a todos os meus alunos, aqueles que tive um contato mais próximo, por serem tão abertos assim como eu fui. a defesa desta tese acaba justamente no último dia que vou à uff: é de fato um ciclo que se fecha e bem apertado.

8.

ao longo do caminho também encontramos outras pessoas que marcaram. não posso me

esquecer do felipe (a.k.a. maizen), pessoa doce e que sempre lembra de mim nos bons momentos da vida. stephen chapman que, reconhecidamente, nos agradeceu com o período mais feliz que meu grupo de amigos teve em petrópolis. reconheço também que o valter hugo mãe, escritor português, marcou muito da minha escrita, a forma como ele escreve e descreve; é um reconhecimento que ele não vai ler, mas que preciso fazer. durante um tempo eu fiquei com minha escrita travada, estagnada, e quem me ajudou com um pequeno curso foi o thiago calago (a.k.a. senhor papaya) e que eu pude voltar a escrever, além de que eu descobri uma nova forma de ler ficção. não poderia de agradecê-lo de forma alguma. meu carinho para clarissa (a.k.a. bissa) pelos momentos e conversas, para bianca pelas andanças em petrópolis e comilanças, para ana pelo carinho e apoio na tese e pelas melhores coisas do ri de janê.

9.

algumas pessoas faltamente foram esquecidas ou omitidas por livre deliberação do autor. eu quis remorar as pessoas que mais me marcaram ao longo dos anos, sem peso, sem culpa. acabamos que sempre nos reconstruímos, nos adaptamos e reabsorvemos tudo. uma frase que me acompanha desde o ensino médio e que citei no discurso de formatura é: "la reabsorción de la circunstancia es el destino concreto del hombre". há uma também do livro o filho de mil homens do valter hugo mãe que diz: "a felicidade é a aceitação do que se é e se pode ser". se hoje estou aqui foi por justamente isso.

10.

por fim, agradeço a capes e cnpq pois sem essas agências seria impossível fazer pesquisa no brasil. já não é muito fácil com elas em diversos lugares, e por isso agradeço ao lnce pelo privilégio de fazer parte do corpo discente. alana, oibb, obrigado por me ajudar na correção. durá, meu analista, *gracias* por ser essa pessoa incrível e inteligente que me ajudou nesses momentos ruins. não posso esquecer de ana neri, marcelly e roberta que trabalham na secretaria e sempre trataram todos muito bem. ah, tem a bete da limpeza também, muito obrigado!

sem esquecer de: alexandra elbakyan, aaron swartz e meus amiguinhos da genesis library.

11.

porque é primo.

*"Me desculpe o acaso por chamá-lo necessidade..."*  
*(Wisława Szymborska)*

# Resumo

A computação quântica se mostra como uma das áreas mais promissoras na busca de algoritmos para problemas clássicos, o que nos permite alargar as fronteiras da computação em aspectos teóricos. A computação quântica propõe alguns modelos de caminhadas quânticas, já sendo utilizado com sucesso dentro da computação clássica como caminhadas aleatórias e algoritmos randomizados, para a solução de diversos problemas como: distinção de elementos, verificação de produto matricial, associatividade de operações binárias, busca de triângulos em grafos, comutatividade em grupos e problemas de busca. Nesta tese iremos utilizar o modelo de caminhada quântica escalonada com hamiltonianos, sendo este um modelo que generaliza outras caminhadas. O primeiro problema analisado será o da grade de cliques onde encontramos sua decomposição espectral e observamos um comportamento análogo ao da caminhada quântica com moeda em grade bidimensional. Um segundo problema será o da grade hexagonal, sendo um grafo bastante interessante pois se assemelha à estrutura do grafeno e que possui diversas aplicações, e que iremos decompor o operador de forma geral na caminhada quântica escalonada com hamiltonianos, verificaremos que para este modelo não encontramos o fenômeno de localização e analisaremos o problema de busca.

**Palavras-chave:** Caminhada Quântica Escalonada; Grade Hexagonal; Grafos; Problema de Busca.

# Abstract

Quantum computing presents itself as one of the most promising areas in the search for algorithms for classical problems, making it possible to broaden the computing frontiers on theoretical aspects. Quantum computing suggests a variety of quantum walk models which have already been successfully used in classical computing as random walks and randomized algorithms achieving solutions for several problems such as: element distinction, matrix multiplication verification, associativity of binary operation, triangle finding problem, testing group commutativity and searching problems. Throughout this thesis we shall use the staggered quantum walk model with hamiltonians that generalizes other quantum walk models. The first problem we analyzed was the clique lattice where we found its spectral decomposition and a similar behavior was observed regarding the coined quantum walk on two-dimensional lattice. Finally, we took up the problem of a hexagonal lattice, a very interesting graph which is comparable to the graphene structure with several applications. We applied a general decomposition to the operator, using staggered quantum walk with hamiltonians, found out the non-existence of localization phenomena and we also verify its performance – the best, up to now – on searching problems.

**Keywords:** Staggered Quantum Walk; Hexagonal Lattice; Graphs; Searching Problem.

# Lista de figuras

Figura 1 – O gráfico da reta é composto pela tesselação em vermelho com vértices $\alpha_x = \{2x, 2x + 1\}$ e azul com vértices em $\beta_x = \{2x + 1, 2x + 2\}$ . . . . .	27
Figura 2 – Distribuição de probabilidade para a caminhada quântica escalonada na reta, após 50 passos, e utilizando $\theta = \pi/3, \pi/4, \pi/5$ com a mesma condição inicial $ \psi(0)\rangle = ( 0\rangle +  1\rangle)/\sqrt{2}$ . . . . .	28
Figura 3 – Distribuição de probabilidade após 50 passos considerando duas condições iniciais $ \psi(0)\rangle$ distintas. . . . .	28
Figura 4 – Desvio padrão da reta em comportamento assintótico em função de $\theta$ . . . . .	29
Figura 5 – Tesselagens da grade bidimensional . . . . .	30
Figura 6 – Distribuição de probabilidade em grade bidimensional $180 \times 180$ após 43 passos considerando duas condições iniciais $ \psi(0)\rangle$ distintas. . . . .	32
Figura 7 – Distribuição de probabilidade em grade bidimensional $180 \times 180$ após 43 passos considerando dois ângulos $\theta$ distintos. . . . .	32
Figura 8 – Desvio padrão em função de $\theta$ na grade bidimensional. . . . .	33
Figura 9 – Diagrama de inclusões das caminhadas quânticas . . . . .	34
Figura 10 – Grafo com cliques de 8 vértices na tesselação em azul, 4 vértices na tesselação em vermelho e interligados. A geometria é de um tórus na fronteira. . . . .	35
Figura 11 – Distribuição de probabilidade após 22 passos, variando o ângulo $\theta$ nos hamiltonianos, para $n = 45$ , em grade de cliques. . . . .	37
Figura 12 – Distribuição de probabilidade após 22 passos, para um ângulo $\theta = \pi/2$ nos hamiltonianos, para $n = 46$ na grade de cliques e variando a condição inicial. . . . .	38
Figura 13 – Distribuição de probabilidade após 22 passos, variando o ângulo $\theta$ nos hamiltonianos, para $n = 45$ , em grade de cliques condensada. . . . .	38
Figura 14 – Desvio padrão em comportamento assintótico para grade cliques condensada. . . . .	39
Figura 15 – Relação entre padrões que emergem na natureza e forças físicas – Ball (2009). . . . .	47
Figura 16 – Tubo de fulereno – Mintmire, Dunlap e White (1992). . . . .	48
Figura 17 – A figura mostra uma pequena parte da grade hexagonal. Os vetores $\vec{e}_x$ e $\vec{e}_y$ são mostrados em preto e os vetores $\vec{r}$ em azul. A condição de fronteira é de um toro seguindo as direções $\vec{e}_x$ e $\vec{e}_y$ . Os vértices são identificados por $(x, y, p)$ , onde $p = 0$ denota vértices vazios e $p = 1$ vértices cheios. As tesselagens são representadas nas cores vermelho, verde e azul. . . . .	49

Figura 18 – Distribuição de probabilidade em grade hexagonal com $n = 121$ , após 58 passos, utilizando duas condições iniciais distintas, considerando $\theta = \pi/3$ .	50
Figura 19 – Distribuição de probabilidade em grade hexagonal com $n = 121$ , após 58 passos, utilizando ângulos distintos e condição inicial $ \psi(0)\rangle =  \psi_0^a\rangle$ .	51
Figura 20 – Desvio padrão $\sigma(t)$ para a grade hexagonal em função do tempo para $\theta = \pi/30, \theta = 4\pi/30, \theta = 7\pi/30, \theta = \pi/3, \theta = 11\pi/3$ .	55
Figura 21 – $\sigma(t)/t$ para a grade hexagonal como função de $\theta$ para $t$ suficientemente grande.	55

# Lista de tabelas

Tabela 1 – Decomposição espectral do operador $U$ para a grade de cliques. . . . .	45
--	----

# Lista de abreviaturas e siglas

k-SAT	Problema de satisfabilidade com cláusulas de no máximo $k$ literais
CQE	Caminhada Quântica Escalonada
AKR	Algoritmo de Ambainis, Kempe e Rivosh
SKW	Algoritmo de Shenvi, Kempe e Whaley

# Lista de símbolos

$K_n$	Clique de $n$ vértices
$G = (V, A)$	Grafo com arestas no conjunto $A$ e vértices em $V$
$\mathcal{O}(\cdot)$	Complexidade do pior caso assintótico
$\Omega(\cdot)$	Complexidade do melhor caso assintótico
$\Theta(\cdot)$	Complexidade exata no caso assintótico
$\mathcal{T}_k$	Tesselagem $k$ de um grafo
$\langle \cdot  $	Vetor no espaço de Hilbert chamado <i>bra</i> em notação de Dirac
$ \cdot \rangle$	Vetor dual no espaço de Hilbert chamado de <i>ket</i> em notação de Dirac
$\sigma$	Desvio padrão
$\sigma_x$	Desvio padrão da variável aleatória $x$
$\sigma_y$	Desvio padrão da variável aleatória $y$
$\mathcal{H}^N$	Espaço de Hilbert de dimensão $N$
$A^*$	Conjugado da matriz $A$
$ \psi_i\rangle \langle \psi_j $	Produto externo entre $ \psi_i\rangle$ e $\langle \psi_j $
$\langle \psi_i   \psi_j \rangle$	Produto interno entre $\langle \psi_i  $ e $ \psi_j \rangle$
$\langle \psi_i   A   \psi_j \rangle$	Produto interno entre $\langle \psi_i  $ e $A   \psi_j \rangle$

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>18</b>
1.1	Computação Quântica: de Feynman a Deutsch	18
1.2	Os Algoritmos de Grover e Shor	20
1.3	Caminhadas Aleatórias Clássicas e Quânticas	21
1.4	Caminhadas Aleatórias em Grade Hexagonal	23
1.5	Organização do Texto e Contribuições de Pesquisa	24
<b>2</b>	<b>Modelo de Caminhada Quântica Escalonada</b>	<b>25</b>
2.1	Introdução à Caminhada Quântica Escalonada	25
2.2	Caminhada na Reta	26
2.3	Caminhada na Grade Bidimensional	30
2.4	Equivalências e Inclusões das Caminhadas	34
<b>3</b>	<b>Caminhada Quântica Escalonada em uma Grade de Cliques</b>	<b>35</b>
3.1	Operadores de Evolução	36
3.2	Bases de Fourier	39
3.3	Matriz Reduzida $8 \times 8$	40
3.4	Matriz Reduzida $4 \times 4$	42
3.5	Resultados e Análise	45
<b>4</b>	<b>Caminhada Quântica Escalonada em Grade Hexagonal</b>	<b>47</b>
4.1	Operador de Evolução	48
4.2	Análise de Fourier	51
4.3	Localização	53
4.4	Desvio Padrão	54
4.5	Problema de Busca	56
<b>5</b>	<b>Discussão, Conclusão e Perspectivas</b>	<b>61</b>
	<b>Referências</b>	<b>63</b>
	<b>Apêndices</b>	<b>70</b>
	<b>APÊNDICE A Computação Quântica</b>	<b>71</b>
	<b>APÊNDICE B Análise de Fourier em Grade de Cliques</b>	<b>74</b>
	B.1 Matrizes reduzidas $\tilde{U}_0$ e $\tilde{U}_1$ dimensão $8 \times 8$	74
	B.2 Matrizes reduzidas $\tilde{U}_0$ e $\tilde{U}_1$ dimensão $4 \times 4$	77
	<b>APÊNDICE C Análise de Fourier em Grade Hexagonal</b>	<b>80</b>
	<b>APÊNDICE D C é <math>\Theta(\sqrt{\ell n n})</math></b>	<b>83</b>

# 1 Introdução

*"No existimos en la mayoría de esos tiempos; en algunos existe usted y no yo; en otros, yo, no usted; en otros, los dos."*

---

— Jorge Luis Borges,  
FICCIONES

A introdução desta tese será uma caminhada que parte das origens da computação quântica, passando por nomes como o de Richard Feynman, Paul Benioff e Yuri Manin, tendo neles um possível início da discussão sobre computação quântica, e chegando em sua formulação com David Deutsch. Posteriormente, o texto ganha um pouco mais de vigor com os revolucionários algoritmos de Lov Grover e Peter Shor, destacando este modelo de computação como um novo paradigma a ser explorado na teoria da complexidade.

O tema específico da tese começa a despontar quando colocamos os algoritmos baseados em caminhadas aleatórias clássicas, sendo elas parte de uma metodologia para construção de algoritmos com viés randomizado. O ponto final está na caminhada quântica, com diversos modelos elaborados ao longo dos últimos anos, e usaremos uma específica: caminhada quântica escalonada. A última parte elenca fatos físicos sobre o modelo de grades hexagonais, principalmente no grafeno, instituindo assim uma importância de pesquisa; após isso, mostramos o estado da arte deste problema em caminhadas quânticas, bem como no problema chamado de localização e que aparece em diversas caminhadas quânticas. Dependendo da familiaridade do leitor com o assunto, as primeiras partes da introdução são perfeitamente escapáveis. Contudo, colocamos um pouco mais de detalhes em certas partes históricas da computação quântica que são omitidas em alguns textos.

## 1.1 Computação Quântica: de Feynman a Deutsch

[Feynman \(1959\)](#) em uma de suas palestras visionava que os computadores ocupavam prédios inteiros e que deveríamos miniaturizar todos os seus componentes até uma escala atômica, como ele mesmo afirma: não necessitamos de tanto espaço para carregar tão pouca informação. Contudo, ele ainda previu que esbarraríamos em fenômenos tipicamente quânticos se assim fizéssemos. Não sabemos se por um acaso de genialidade, mas ele acaba dizendo que nesta microescala teríamos novos fenômenos, forças e, principalmente, possibilidades. A computação clássica, de fato, esbarra com o limite de escala dos componentes

em seus circuitos e [Moore \(1965\)](#) descreveu uma lei onde os transistores num circuito integrado dobrariam por ano e fatalmente chegaríamos a um limite atômico.

A computação quântica começa a ganhar corpo pela década de 1980 com ideias mais robustas de seu potencial computacional. [Benioff \(1980\)](#) teorizou um computador baseado na mecânica quântica, mas fazendo algumas simplificações nos Hamiltonianos de sua dinâmica, com a finalidade de construir uma Máquina de Turing. Esse trabalho nos diz que se pudéssemos usar todo o potencial da mecânica quântica, sem essa necessidade de simplificar a dinâmica, teríamos uma máquina tão potente quanto a clássica ou mais – e aqui encaixamos as novas possibilidades. [Feynman \(1982\)](#) ainda questiona que modelo de computador iríamos utilizar para simular fenômenos físicos e, certamente, não seria o modelo clássico vigente na época pela complexidade que um sistema quântico possui. Pelo início desta mesma década [Manin \(1980\)](#), na época vivendo na União Soviética, chegou a realizações teóricas semelhantes e de forma independente. Portanto, Richard Feynman, Gordon Moore, Paul Benioff e Yuri Manin foram os primeiros a esculpir o que seria a computação quântica.

De forma paralela tivemos diversos trabalhos em teoria da informação que ajudaram a alavancar a computação quântica. [Wiesner \(1960\)](#) observou que a mecânica quântica pode trazer formas mais seguras de trocar informação, onde uma mensagem que fosse interceptada seria destruída – ele também usou esse princípio pra produzir dinheiro não-falsificável. Esse trabalho gerou as contribuições de [Bennett e Brassard \(1984\)](#) em distribuição de chaves criptográficas e que impulsionou a criptografia quântica, sendo uma das áreas mais importantes de pesquisa atual. [Holevo \(1973\)](#), através de um teorema que leva seu nome, afirma que, de forma contraintuitiva, um bit quântico só pode carregar no máximo um bit clássico de informação – pela forma como acessamos esta informação através de uma medição – e [Ingarden \(1976\)](#) observa que a teoria da informação clássica de Shannon não é diretamente generalizável para o caso quântico. [Poplavskii \(1975\)](#) demonstrou que o princípio da superposição quântica torna ineficaz a simulação clássica de sistemas quânticos. Tivemos ainda dois trabalhos que foram muito importantes para a implementação de um computador quântico: [Bennett \(1973\)](#) mostrando um modelo de computação reversível e [Toffoli \(1980\)](#) com um conjunto universal de portas para este modelo, ambos para computação clássica e que são remontados na versão quântica – [DiVincenzo \(1994\)](#) refaz esse resultado com portas de apenas dois bits. Estes trabalhos começaram a dar forma à computação quântica no que tange a informação transmitida e processada, o que nos leva até sua formalização.

[Turing \(1936\)](#) descreve um modelo abstrato de computação clássica, hoje chamado de Máquina de Turing, e que diz como processamos a informação e qual a complexidade do problema em um computador clássico – caso tenha solução. O análogo para a computação quântica aparece com [Deutsch \(1985\)](#) quando ele constrói um modelo de computação

quântica universal e que coloca todos as novas propriedades quânticas não reproduzíveis no caso clássico e que chamamos de Máquina de Turing Quântica. Em um trabalho posterior, [Deutsch \(1989\)](#) estabelece um conjunto de portas universais para a computação quântica. Contudo, ainda ficava em aberto se esses novos ingredientes da mecânica quântica nos dariam uma computação mais potente – se haveria algum problema que nenhum computador clássico resolvesse de forma mais eficiente que o quântico. Poucos anos depois [Deutsch e Jozsa \(1992\)](#) descrevem um problema que a computação quântica resolve exponencialmente mais rápido que qualquer computador clássico, mostrando que esses novos elementos realmente trazem ganhos – hoje conhecido como Algoritmo de Deutsch-Jozsa. Por outro lado, esse problema proposto não tem grande finalidade prática, embora seja um marco na história da computação, assim como afirmam [Berthiaume e Brassard \(1992\)](#) sobre os novos desafios que esse algoritmo impõe à computação. O que motivou a década de 1990 a procurar algoritmos nesse modelo de computação que tenham relevância prática, onde encontramos os algoritmos de Peter Shor e Lov Grover.

## 1.2 Os Algoritmos de Grover e Shor

O Algoritmo de Deutsch-Jozsa foi um dos grandes marcos da computação quântica e que inspirou [Simon \(1997\)](#) a criar um segundo problema onde temos também um ganho exponencial com relação ao caso clássico. Embora seja bastante artificial este último problema proposto, ele inspirou [Shor \(1994\)](#) a construir um dos algoritmos mais importantes da computação – e que lhe rendeu as medalhas Nevanlinna em 1998 e Gödel em 1999. Um outro trabalho que ajudou neste algoritmo é o de [Coppersmith \(1994\)](#) onde explora a transformada de Fourier no caso quântico. O Algoritmo de Shor, como hoje é conhecido, resolve o problema de fatoração em primos de números inteiros, o que poderia levar à quebra da criptografia baseada em fatoração de números primos – onde nasce a pesquisa em criptografia pós-quântica como aponta [Bernstein, Buchmann e Dahmen \(2009\)](#).

O problema de busca em uma lista sem ordem conhecida é um dos problemas centrais em banco de dados, ainda mais se tratando em termos de pesquisa em internet. [Grover \(1996\)](#) desenvolve um algoritmo que é quadraticamente mais rápido que o caso clássico. O caso clássico em uma lista com  $N$  elementos, no pior caso, tem complexidade diretamente proporcional à lista, e escrevemos  $\mathcal{O}(N)$ , enquanto que o algoritmo de Grover tem complexidade  $\mathcal{O}(\sqrt{N})$  – demonstrado por [Zalka \(1999\)](#) ser o caso ótimo em problemas de busca. Este algoritmo ainda teve sua generalização com [Brassard et al. \(2002\)](#) especificando a técnica de amplificação de amplitude, onde a probabilidade do elemento procurado é aumentada até atingir seu possível máximo. Completando ainda o problema de busca [Grover \(1999\)](#) descreve o problema para busca estruturada e [Farhi e Gutmann \(1997\)](#) demonstram que essa complexidade persiste para este caso. Por outro lado, o problema de

busca se aplica diretamente ao de otimização de funções: [Dürr e Høyer \(1996\)](#) elaboraram como procurar o menor elemento em uma lista, [Baritompá, Bulger e Wood \(2005\)](#) para problemas de otimização global e [Lara, Portugal e Lavor \(2014\)](#) com um método híbrido com rotinas clássicas embutidas.

### 1.3 Caminhadas Aleatórias Clássicas e Quânticas

Dentro da computação clássica temos uma classe de algoritmos baseada em variáveis aleatórias e que podemos chamar de algoritmos randomizados. Essa classe foi um divisor de águas na solução de problemas clássicos que compõem o panorama da computação teórica. [Motwani e Raghavan \(1995\)](#) e [Papadimitriou \(1994\)](#) descrevem diversos problemas que podem ser resolvidos com essa técnica – baseados em cadeias de Markov e método de Monte Carlo. Alguns dos problemas são o do cálculo do volume de um corpo convexo proposto por [Dyer, Frieze e Kannan \(1991\)](#), também o de encontrar o valor aproximado do permanente de uma matriz de entradas não-negativas no trabalho de [Jerrum, Sinclair e Vigoda \(2004\)](#) e do  $k$ -SAT e problemas de satisfabilidade de restrições com [Schöning \(1999\)](#). Os passeios aleatórios entram nessa classe de algoritmos se imaginarmos uma partícula caminhando segundo uma variável aleatória de forma sucessiva e independente.

A teoria de algoritmos randomizados, bem como os passeios aleatórios, foi adaptada à computação quântica com o nome de caminhada quântica. A primeira vertente, atualmente com quatro, surgiu com [Aharonov, Davidovich e Zagury \(1993\)](#) e teve o nome de caminhada quântica com moeda – considerando o tempo como variável discreta. As primeiras análises desta caminhada surgiram com [Nayak e Vishwanath \(2000\)](#) e [Ambainis et al. \(2001\)](#) que estudaram o caso unidimensional da linha. Casos mais gerais apareceram posteriormente quando [Inui, Konishi e Konno \(2003\)](#) analisaram em uma grade bidimensional e [Aharonov et al. \(2001\)](#) em grafos gerais. Começamos a ver as primeiras aplicações algorítmicas quando [Shenvi, Kempe e Whaley \(2003\)](#) mostram o problema de busca adaptado à caminhada quântica e também com [Ambainis \(2007\)](#) no problema de distinção de elementos. Resultados mais teóricos apareceram com [Konno \(2002\)](#) mostrando um teorema demarcando que as caminhadas quântica e clássica, no caso unidimensional, são marcadamente distintas e [Grimmett, Janson e Scudo \(2003\)](#) generalizam para dimensões maiores. Um último trabalho a ser mencionado é do [Lovett et al. \(2010\)](#) com a possibilidade de se construir um modelo de computação quântica universal através de caminhadas quânticas discretas.

Um segundo modelo de caminhada quântica, mas agora a tempo contínuo, surgiu quando [Farhi e Gutmann \(1998\)](#) codificaram o problema de Grover através de dois hamiltonianos, um inicial e outro final, e fazendo o sistema evoluir no tempo entre eles. [Farhi et al. \(2000\)](#) revisitaram este modelo de computação, agora chamada de adiabática

pelo processo de evolução do sistema, para resolver problemas de satisfabilidade booleana. [Dam, Mosca e Vazirani \(2001\)](#) notaram certas limitações em problemas de minimização onde este modelo de computação é ineficiente. [Childs e Goldstone \(2004\)](#) estabelecem a caminhada quântica para este paradigma de computação e especifica o problema de busca nele, podendo ser chamado de caminhada quântica adiabática. [Aharonov et al. \(2007\)](#) demonstram a equivalência entre este modelo e o dito convencional, no sentido histórico da computação quântica. Por fim, [Childs \(2009\)](#) mostra que este modelo é universal. [Chakraborty et al. \(2016\)](#) dizem que o problema de busca é ótimo para quase todos os grafos. Portanto, temos a caminhada discreta e contínua, com relação à variável do tempo, como modelos de de computação e construção de algoritmos.

Podemos encontrar ainda um terceiro modelo de caminhada quântica com [Szegedy \(2004\)](#), onde ele descreve esta caminhada baseada nas caminhadas aleatórias através de cadeias de Markov e, através de uma duplicação do grafo, utiliza um grafo bipartido para sua construção. Esta caminhada, por condições de ergodicidade e simetria da cadeia de Markov, possui um ganho quadrático em problemas de busca, assim como esperado pelo algoritmo de Grover. [Magniez, Santha e Szegedy \(2007\)](#) utilizam este modelo para o problema de detecção de triângulo em um grafo não-direcionado. O problema de busca foi descrito por [Magniez et al. \(2006\)](#). Outros problemas foram descritos por [Santha \(2008\)](#): distinção de elementos, verificação de produto matricial, associatividade de operações binárias, triângulos em grafos e comutatividade em grupos. [Krovi et al. \(2010\)](#) ainda demonstram que encontrar um elemento marcado num problema de busca é tão fácil quanto detectar, o que abre um pouco mais os limites para o problema de busca. Finalmente, [Portugal \(2015\)](#) estabelece a equivalência entre as caminhadas com moeda e de Szegedy através de um quarto modelo que engloba e expande este último.

No trabalho de [Patel, Raghunathan e Rungta \(2005\)](#) temos a descrição de uma caminhada quântica sem a necessidade de moeda. O problema de busca em grades bidimensionais foi descrito, posteriormente, por [Patel, Raghunathan e Rahaman \(2010\)](#) e para hipercubos de dimensão maior no trabalho [Patel e Rahaman \(2010\)](#). Uma primeira metodologia de construção de operadores de evolução aparece com [Falk \(2013\)](#) com as chamadas tesselas, baseadas em operadores de difusão local. A análise desse modelo para o problema unidimensional aparece com [Portugal, Boettcher e Falkner \(2015\)](#) já utilizando a abordagem construtiva de tesselas para os operadores de evolução. Logo em seguida temos a formalização deste novo tipo de caminhada e que recebeu o nome de *Staggered Quantum Walk* (Caminhada Quântica Escalonada) no trabalho de [Portugal et al. \(2016\)](#) e que mostra em que instâncias este modelo se equivale ao de Szegedy, sendo que este novo modelo engloba outras caminhadas a tempo discreto em diversas instâncias. [Portugal, Oliveira e Moqadam \(2017\)](#) ainda expandem este modelo adicionando hamiltonianos à dinâmica do passeio e que abre mais portas de para o modelo. A análise para o problema de busca em grades bidimensionais como o uso de hamiltonianos é feita por [Portugal](#)

e [Fernandes \(2017\)](#). Por fim, temos uma análise da caminhada contínua utilizando este modelo discreto com [Coutinho e Portugal \(2018\)](#) e uma possível implementação desta caminhada em [Moqadam, Oliveira e Portugal \(2017\)](#).

## 1.4 Caminhadas Aleatórias em Grade Hexagonal

Há uma infinidade de grafos a serem analisados, contudo a grade hexagonal ganha um status maior por suas aplicações físicas e sua simplicidade estrutural. O grafeno, por exemplo, é uma estrutura composta de carbonos dispostos de forma hexagonal e que vem sendo utilizado de diversas formas. Em aspectos de transporte de informação, [Hamada e Oshiyama \(1992\)](#) predizem, teoricamente, estruturas em microtubos de grafeno com suas propriedades de transporte de elétrons. Paralelamente, [Mintmire, Dunlap e White \(1992\)](#) descrevem as propriedades de microtubos em carbono que se assemelham aos metais, então possuindo alta capacidade condutiva. [Tans, Verschueren e Dekker \(1998\)](#) descrevem a criação de transistores com nanotubos de carbono em temperatura ambiente. Um trabalho importante é dado com [White e Todorov \(1998\)](#) e que mostram que em certas condições essa estrutura possui propriedades balísticas de transporte. [Bachtold et al. \(2001\)](#) elaboram circuitos lógicos em nanotubos de carbono em estrutura de grafeno. [Clegg et al. \(2014\)](#) cria um aparato em matéria que resolve o problema do caixeiro-viajante com nanotubos de carbono.

Dentro do campo de passeios quânticos temos o trabalho de [Jafarizadeh e Sufiani \(2007\)](#) analisando as distribuições que esse passeio permite e [Foulger, Gnutzmann e Tanner \(2015\)](#) descrevendo no problema de busca, ambos utilizando o passeio a tempo contínuo. [Abal et al. \(2010\)](#) estudaram este problema no passeio a tempo discreto com moeda e [Bohm et al. \(2015\)](#) criam um aparato físico para o problema de busca utilizando microondas clássicas. No trabalho de [Bougroua et al. \(2016\)](#) temos a análise de transporte através do passeio a tempo discreto com moeda e [Karafyllidis \(2015\)](#) utilizando as portas lógicas como moeda. [Venâncio, Andrade e Luz \(2013\)](#) que colocam relações de equivalência entre alguns tipos de passeios a tempo discreto.

Um fenômeno que aparece em passeios aleatórios é o da localização, sendo uma probabilidade persistente nos vértices da condição inicial. [Inui, Konno e Segawa \(2005\)](#) mostram que esse fenômeno de localização acontece no passeio com moeda no caso unidimensional e no caso bidimensional é analisada com [Kollár, Kiss e Jex \(2015\)](#) e também com [Franco e Paternostro \(2015\)](#) – neste último, em alguns regimes a localização é bastante acentuada. Outras alternativas de mostrar este fenômeno aparecem com [Stefan, Jex e Kiss \(2008\)](#) através de recorrência com o número de Pólya em grafos e também com [Segawa \(2013\)](#). Temos uma análise para este fenômeno em grade hexagonal com [Lyu, Yu e Wu \(2015\)](#).

## 1.5 Organização do Texto e Contribuições de Pesquisa

Construímos este texto a partir das caminhadas quânticas escalonadas, sendo ela nosso ponto de partida. No capítulo 2 nós construímos o modelo de caminhada quântica escalonada, mostrando o que seria uma tesselação e como ela se desdobra na construção do operador de evolução. Ainda neste capítulo, ilustramos o comportamento desta caminhada nos problemas da reta e da grade bidimensional, introduzimos novas simulações da dinâmica deste passeio e sobre desvio padrão. Por fim, colocamos alguns teoremas pertinentes a essa caminhada e que demonstram certa generalidade.

No capítulo 3 encontramos uma análise feita na grade de cliques, um grafo com cliques  $K_8$  interligadas por  $K_4$ . A análise deste grafo é inédita e nos é interessante pois sua dinâmica não está inclusa na caminhada de Szegedy. Fizemos simulações para mostrar o comportamento desta caminhada neste grafo e do desvio padrão, obtivemos toda a análise espectral do operador e, por fim, algumas conclusões.

As maiores contribuições desta tese estão no capítulo 4. Analisamos o problema de busca em grade hexagonal através da caminhada quântica escalonada e utilizamos o modelo estendido com hamiltonianos. Temos para este problema uma análise para um ângulo genérico nos hamiltonianos, não antes analisado, sua performance para o problema de busca é equiparada às melhores caminhadas da literatura. Um fato curioso que analisamos, e que não aparece em outras caminhadas, é que ele não possui o fenômeno de localização – apenas em casos degenerados – e que tem influência no problema de busca. Os cálculos encontram-se nos apêndices do texto e no artigo de [Chagas et al. \(2018\)](#).

No fim do texto temos três apêndices. O primeiro deles tem por finalidade expor princípios básicos da computação quântica e que dá base para a compreensão do texto, caso não tenha familiaridade. O segundo e terceiro apêndices são para deixar o texto mais fluido, onde deixamos diversas contas de decomposição dos operadores para grade de cliques e hexagonal.

## 2 Modelo de Caminhada Quântica Escalonada

Este capítulo tem por partida o modelo de caminhada quântica escalonada e que ilustraremos sua construção e dinâmica através de dois grafos: reta infinita e grade bidimensional. Para tanto, a primeira seção coloca os ingredientes principais para a construção da caminhada e que se dá através das tesselações – a referência que seguiremos será de [Portugal \(2016\)](#). Para elucidar cada componente da caminhada introduziremos o problema da reta, colocaremos alguns resultados já conhecidos e acrescentaremos algumas simulações, seguindo o livro de caminhadas quânticas de [Portugal \(2018\)](#) – sendo esta referência recomendada para entendimento dos outros modelos de caminhadas. A terceira parte será de remontar o problema da grade bidimensional para esta caminhada e insistiremos em mostrar o comportamento da caminhada através de simulações e seguiremos a referência de [Portugal e Fernandes \(2017\)](#), onde conseguem resultados bastante gerais para este grafo. Por fim, mostraremos alguns resultados mais gerais que comparam este modelo de caminhada com outros com referência em [Portugal et al. \(2016\)](#).

### 2.1 Introdução à Caminhada Quântica Escalonada

As caminhadas em grafos possuem uma ideia de localidade, onde o caminhante ó pode ir a um vértice vizinho. Quando transferimos essa ideia para uma caminhada quântica, as probabilidades são distribuídas, para cada passo de tempo, para vértices vizinhos, essa é a localidade esperada. [Falk \(2013\)](#) construiu um modelo que tivesse difusões locais através de tesselações, criando assim operadores locais. As tesselações são essenciais na construção do modelo de caminhada quântica escalonada, e podemos ver outros trabalhos como os de [Abreu et al. \(2017b\)](#) e [Abreu et al. \(2017a\)](#) que investigam a tesselação para grafos.

A caminhada quântica escalonada parte de um grafo  $G = (V, A)$  onde queremos distribuir as probabilidades para vértices vizinhos. Uma forma de captar essa vizinhança é através de cliques, onde todo vértice é vizinho. O modelo de caminhada quântica escalonada dividirá o grafo em cliques para construir sua dinâmica. Dessa forma, definiremos o que é uma tesselação de um grafo.

**Definição 1.** Uma tesselação  $\mathcal{T}$  de um grafo é uma partição do conjunto de vértices em cliques disjuntas. Diremos que uma aresta pertence à tesselação  $\mathcal{T}$  se, e somente se, seus vértices pertencem à clique em  $\mathcal{T}$ . Um elemento da tesselação é chamado de polígono.

Essa forma de particionar o grafo preserva uma localidade estrutural, já que nenhum polígono possui vértices em comum, e que nos será útil para criar os operadores. No entanto,

necessitamos as probabilidades sejam transmitidas de polígono a polígono e, por isso, criamos uma família de tesselagens com essa finalidade.

**Definição 2.** Cobrimento de grafo por tesselação é uma família de tesselagens  $\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2, \dots, \mathcal{T}_k$  onde toda aresta do grafo pertence a alguma clique em alguma tesselação.

A família de tesselagens  $\{\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2, \dots, \mathcal{T}_k\}$  que cobre o grafo nos permite induzir certos operadores  $\{H_1, H_2, \dots, H_k\}$ . Para essa construção iremos criar um estado para cada polígono e que chamaremos de  $\alpha_j^k$ , onde  $k$  é um índice que percorre as tesselagens e  $j$  percorre os polígonos. Portanto, o estado associado a cada polígono será

$$|u_j^k\rangle = \frac{1}{\sqrt{|\alpha_j^k|}} \sum_{l \in \alpha_j^k} |l\rangle. \quad (2.1)$$

Agora, criaremos um operador de reflexão sobre cada tesselação, pois temos um espaço associado a cada uma delas. Então, cada tesselação induz um operador que é local e hermitiano na forma

$$H_k = 2 \sum_{j=1}^p |u_j^k\rangle \langle u_j^k| - I. \quad (2.2)$$

Cada operador  $H_k$  tem a função de difundir localmente, em cada polígono, as probabilidades dentro de cada tesselação. Por outro lado, podemos generalizar esse modelo de caminhada colocando na forma de hamiltonianos, como descrito por [Portugal, Oliveira e Moqadam \(2017\)](#), seguindo a forma

$$U = e^{i\theta_k H_k} \dots e^{i\theta_2 H_2} e^{i\theta_1 H_1} \quad (2.3)$$

onde

$$e^{i\theta_j H_j} = \cos(\theta_j)I + i \operatorname{sen}(\theta_j)H_j. \quad (2.4)$$

Portanto, temos um modelo de caminhada quântica que preserva a localidade dos operadores. As próximas seções irão ilustrar a construção da caminhada para grafos específicos, como da reta infinita e grade bidimensional, e mostrar a dinâmica para cada um deles.

## 2.2 Caminhada na Reta

Nesta seção iremos construir as tesselagens para a caminhada quântica escalonada na reta infinita, os operadores associados a cada uma delas e o operador de evolução com hamiltonianos para este caso. Para tanto, iremos induzir duas tesselagens neste gráfico, sendo dadas pelos conjuntos

$$\mathcal{T}_\alpha = \{\{2x, 2x + 1\} : x \in \mathbb{Z}\}, \quad (2.5)$$

$$\mathcal{T}_\beta = \{\{2x + 1, 2x + 2\} : x \in \mathbb{Z}\}, \quad (2.6)$$

e cada elemento da tesselação possui um estado associado e escrevemos em superposição uniforme como

$$|\alpha_x\rangle = \frac{|2x\rangle + |2x+1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.7)$$

$$|\beta_x\rangle = \frac{|2x+1\rangle + |2x+2\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.8)$$

e tendo a representação gráfica conforme a figura 1 abaixo.

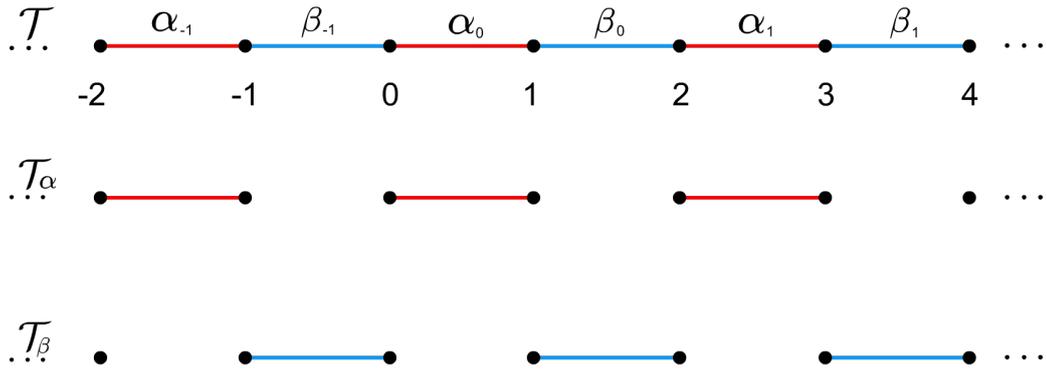


Figura 1 – O gráfico da reta é composto pela tesselação em vermelho com vértices  $\alpha_x = \{2x, 2x+1\}$  e azul com vértices em  $\beta_x = \{2x+1, 2x+2\}$ .

De posse das tesselagens, podemos construir dois operadores associados a cada uma das tesselagens. O operador  $H_\alpha$  está associado à tesselação  $\mathcal{T}_\alpha$ , enquanto que  $H_\beta$  se refere à tesselação  $\mathcal{T}_\beta$  e são dados por

$$H_\alpha = 2 \sum_{x=-\infty}^{\infty} |\alpha_x\rangle \langle \alpha_x| - I, \quad (2.9)$$

$$H_\beta = 2 \sum_{x=-\infty}^{\infty} |\beta_x\rangle \langle \beta_x| - I, \quad (2.10)$$

cujos operadores com hamiltonianos será dado por

$$U = e^{i\theta H_\beta} e^{i\theta H_\alpha} \quad (2.11)$$

e sua evolução temporal seguirá o formato

$$U |\psi(t)\rangle = U^t |\psi(0)\rangle \quad (2.12)$$

onde  $|\psi(0)\rangle$  será a condição inicial para o sistema.

Faremos alguns experimentos numéricos com a finalidade de comprovar alguns fatos dessa caminhada. Um primeiro fato é a da dependência do ângulo com a dinâmica do sistema. Na figura 2 notamos que para  $\theta = \pi/3$  temos uma frente de onda mais para as laterais, contudo o perfil não se altera na alteração do ângulo.

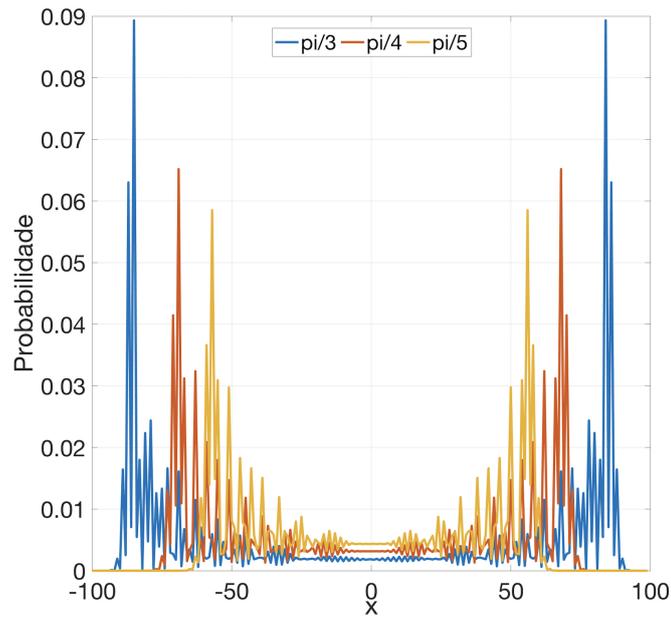


Figura 2 – Distribuição de probabilidade para a caminhada quântica escalonada na reta, após 50 passos, e utilizando  $\theta = \pi/3, \pi/4, \pi/5$  com a mesma condição inicial  $|\psi(0)\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ .

Um segundo experimento seria o da dependência da condição inicial à dinâmica do sistema. Na figura 3 temos que para duas condições iniciais distintas vemos dois tipos de frente de onda, uma se deslocando para a esquerda e uma outra para a direita.

Um terceiro experimento seria para mostrar qual seria o ângulo, dada uma condição inicial fixa, que produz o maior desvio padrão. O desvio padrão será calculado seguindo a

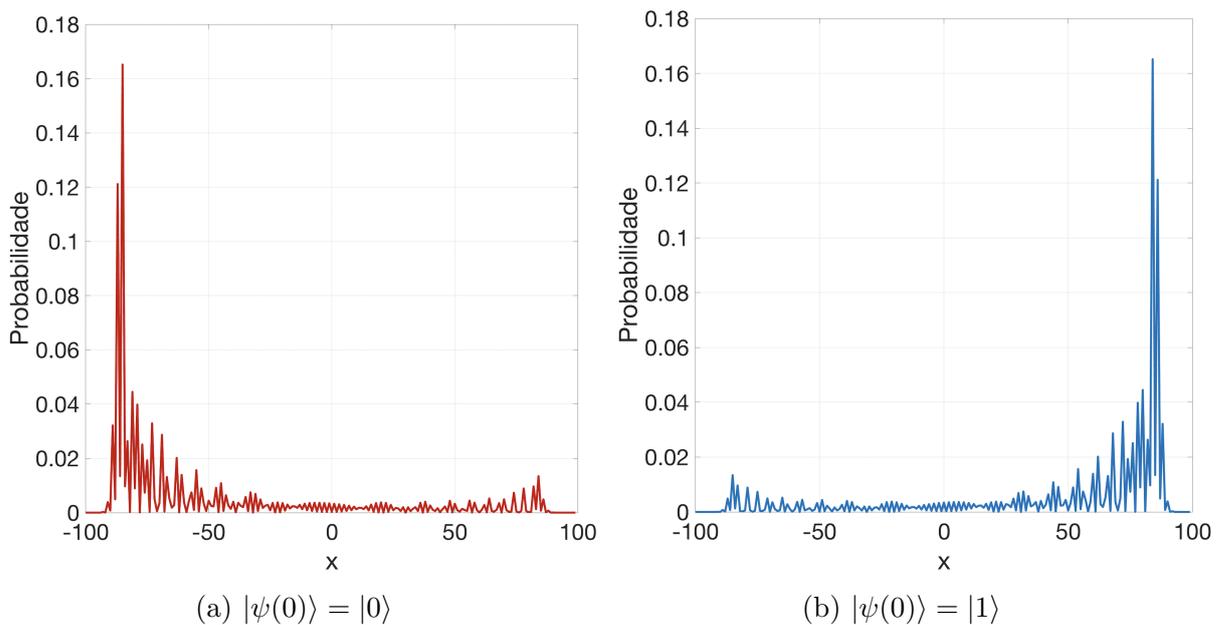


Figura 3 – Distribuição de probabilidade após 50 passos considerando duas condições iniciais  $|\psi(0)\rangle$  distintas.

referência de [Walpole et al. \(2013\)](#). Temos que a probabilidade associada ao vértice  $x$  será dada, no instante  $t$ , como

$$p(x, t) = |\langle x | \psi(t) \rangle|^2 \quad (2.13)$$

e o desvio padrão é entendido como uma distância até a média. Dessa forma, o desvio padrão é dado pela expressão

$$\sigma = \sqrt{\sum_x (x - \mu)^2 p(x, t)} \quad (2.14)$$

onde  $\mu$  é a média dada por

$$\mu = \sqrt{\sum_x x p(x, t)}. \quad (2.15)$$

Por estas definições, como temos na figura 4, fizemos o gráfico para o caso assintótico, escolhendo um valor de  $t$  suficientemente grande e variando os valores de  $\theta$ . Este gráfico numérico é exatamente o encontrado em [Portugal \(2018\)](#).

$$\sigma = 2\sqrt{|\cos(\theta)|} \sqrt{1 - |\cos(\theta)|} t \quad (2.16)$$

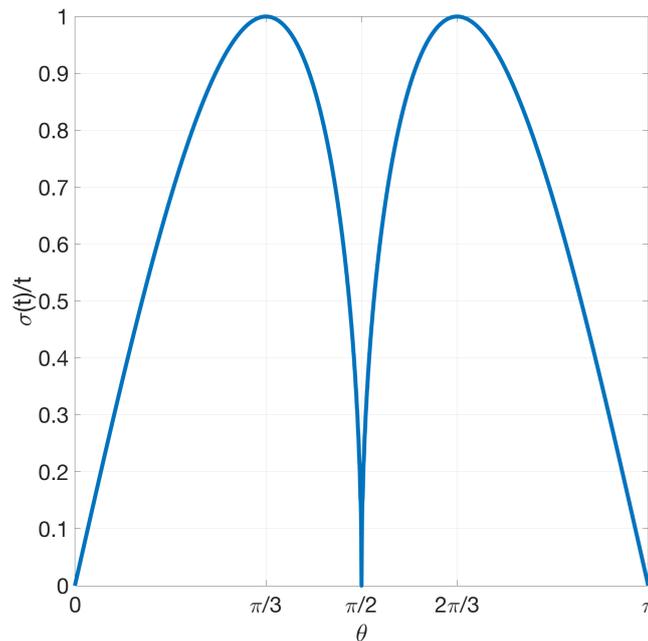


Figura 4 – Desvio padrão da reta em comportamento assintótico em função de  $\theta$ .

## 2.3 Caminhada na Grade Bidimensional

Nesta seção iremos ilustrar a caminhada quântica escalonada através de um problema bidimensional, pois iremos tratar de outros problemas nesta dimensão nos próximos capítulos. No trabalho de [Ambainis, Kempe e Rivosh \(2004\)](#) – conhecido como AKR – temos que o problema de busca neste grafo tem complexidade  $\mathcal{O}(\sqrt{N \log N})$ . O primeiro trabalho com CQE aparece no trabalho de [Patel, Raghunathan e Rungta \(2005\)](#) e sua análise aparece em [Ambainis, Portugal e Nahimov \(2013\)](#). Seguiremos ao longo desta seção os trabalhos de [Portugal e Fernandes \(2017\)](#) e [Fernandes e Portugal \(2016\)](#) onde analisam o problema de busca utilizando o método descrito por [Tulsi \(2008\)](#), e que iremos utilizar no problema da grade hexagonal.

Consideraremos uma grade retangular com  $2n$  vértices em  $x$  e  $2n$  em  $y$  e que perfazem uma fronteira em formato de tórus, e portanto utilizaremos aritmética módulo  $2n$ . Dessa forma, podemos associar um estado  $|x, y\rangle$  a cada vértice da grade, tendo um espaço de dimensão  $4n^2$ .

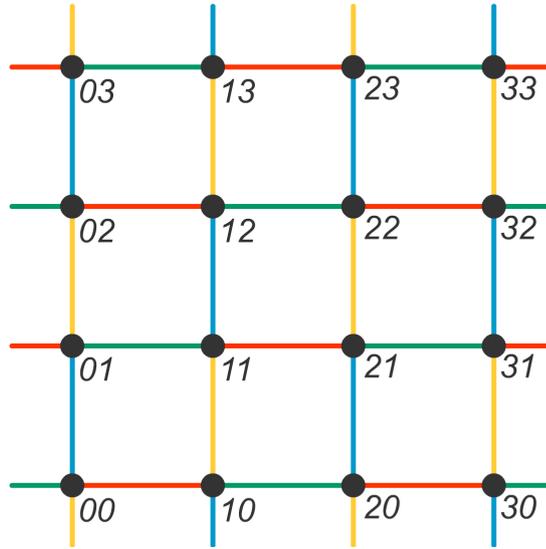


Figura 5 – Tesselagens da grade bidimensional

Podemos recobrir a grade bidimensional com apenas 4 tesselagens, sendo elas escritas como

$$\mathcal{T}_{00} = \{\{(x, y), (x + 1, y)\}, x + y \text{ par}, 0 \leq x, y < 2n\}, \quad (2.17)$$

$$\mathcal{T}_{01} = \{\{(x, y), (x, y + 1)\}, x + y \text{ par}, 0 \leq x, y < 2n\}, \quad (2.18)$$

$$\mathcal{T}_{10} = \{\{(x, y), (x - 1, y)\}, x + y \text{ par}, 0 \leq x, y < 2n\}, \quad (2.19)$$

$$\mathcal{T}_{11} = \{\{(x, y), (x, y - 1)\}, x + y \text{ par}, 0 \leq x, y < 2n\}, \quad (2.20)$$

e cada uma dessas tesselas possui, respectivamente, os estados associados

$$|u_{xy}^{00}\rangle = \frac{|x, y\rangle + |x + 1, y\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.21)$$

$$|u_{xy}^{01}\rangle = \frac{|x, y\rangle + |x, y + 1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.22)$$

$$|u_{xy}^{10}\rangle = \frac{|x, y\rangle + |x - 1, y\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.23)$$

$$|u_{xy}^{11}\rangle = \frac{|x, y\rangle + |x, y - 1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.24)$$

e o gráfico que representa a grade bidimensional é conforme a figura 5.

Da mesma forma que fizemos no problema da reta, iremos construir os operadores associados a cada tessela e que serão operadores de reflexões. Os operadores, seguindo essa numeração da tessela, são

$$H_{00} = 2 \sum_{\substack{x,y=0 \\ x+y \text{ par}}}^{2n-1} |u_{xy}^{00}\rangle \langle u_{xy}^{00}| - I, \quad (2.25)$$

$$H_{01} = 2 \sum_{\substack{x,y=0 \\ x+y \text{ par}}}^{2n-1} |u_{xy}^{01}\rangle \langle u_{xy}^{01}| - I, \quad (2.26)$$

$$H_{10} = 2 \sum_{\substack{x,y=0 \\ x+y \text{ par}}}^{2n-1} |u_{xy}^{10}\rangle \langle u_{xy}^{10}| - I, \quad (2.27)$$

$$H_{11} = 2 \sum_{\substack{x,y=0 \\ x+y \text{ par}}}^{2n-1} |u_{xy}^{11}\rangle \langle u_{xy}^{11}| - I. \quad (2.28)$$

Por fim, utilizaremos estes operadores para construir o de evolução para a caminhada com hamiltonianos como

$$U = e^{i\theta H_{11}} e^{i\theta H_{10}} e^{i\theta H_{01}} e^{i\theta H_{00}} \quad (2.29)$$

O primeiro experimento que faremos consiste em mostrar a sensibilidade da caminhada à condição inicial. Consideraremos as três condições iniciais

$$|\psi_0^A\rangle = |n, n\rangle, \quad (2.30)$$

$$|\psi_0^B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n, n\rangle + |n + 1, n\rangle), \quad (2.31)$$

$$|\psi_0^C\rangle = \frac{1}{2}(|n, n\rangle + |n, n + 1\rangle + |n + 1, n\rangle + |n + 1, n + 1\rangle), \quad (2.32)$$

e a dinâmica da caminhada é mostrada na figura 6

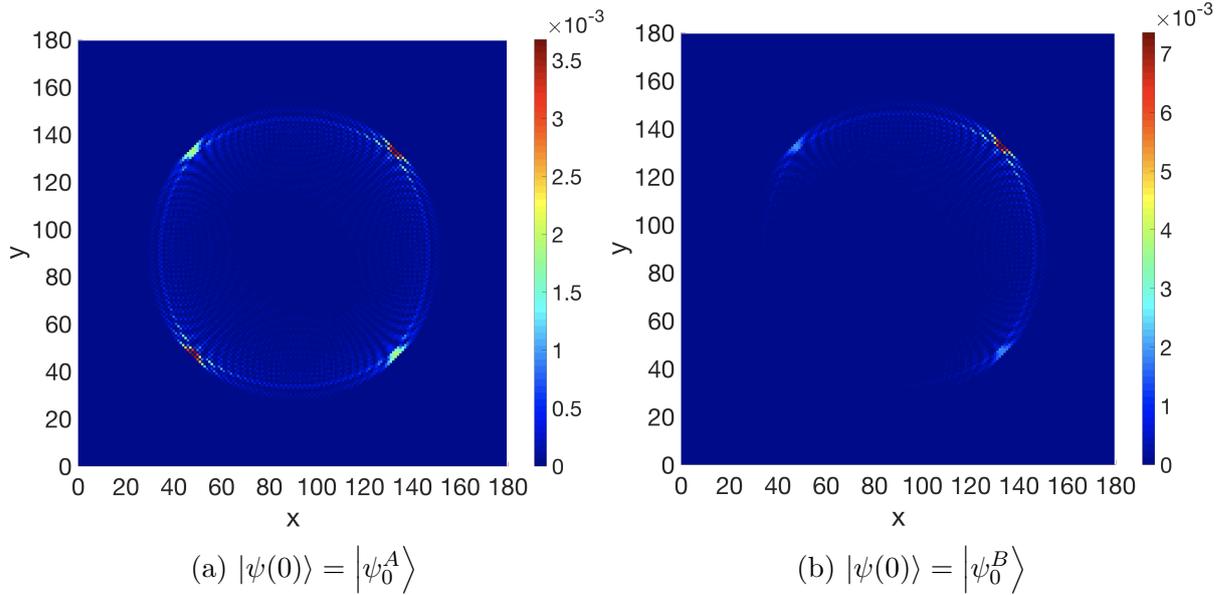


Figura 6 – Distribuição de probabilidade em grade bidimensional  $180 \times 180$  após 43 passos considerando duas condições iniciais  $|\psi(0)\rangle$  distintas.

O segundo experimento consiste em observar a dependência do ângulo na dinâmica da caminhada, bem como o seu desvio padrão. No trabalho de [Fernandes e Portugal \(2016\)](#) temos um forte indicativo, ainda que não tenha demonstração analítica, que o melhor ângulo é  $\theta = \pi/4$ . A figura 7 mostra que a distribuição, de certo modo, encolhe quando pegamos um ângulo diferente de  $\pi/4$ . Faremos, logo mais, uma pequena análise sobre o desvio padrão com um gráfico que indica a escolha do ângulo.

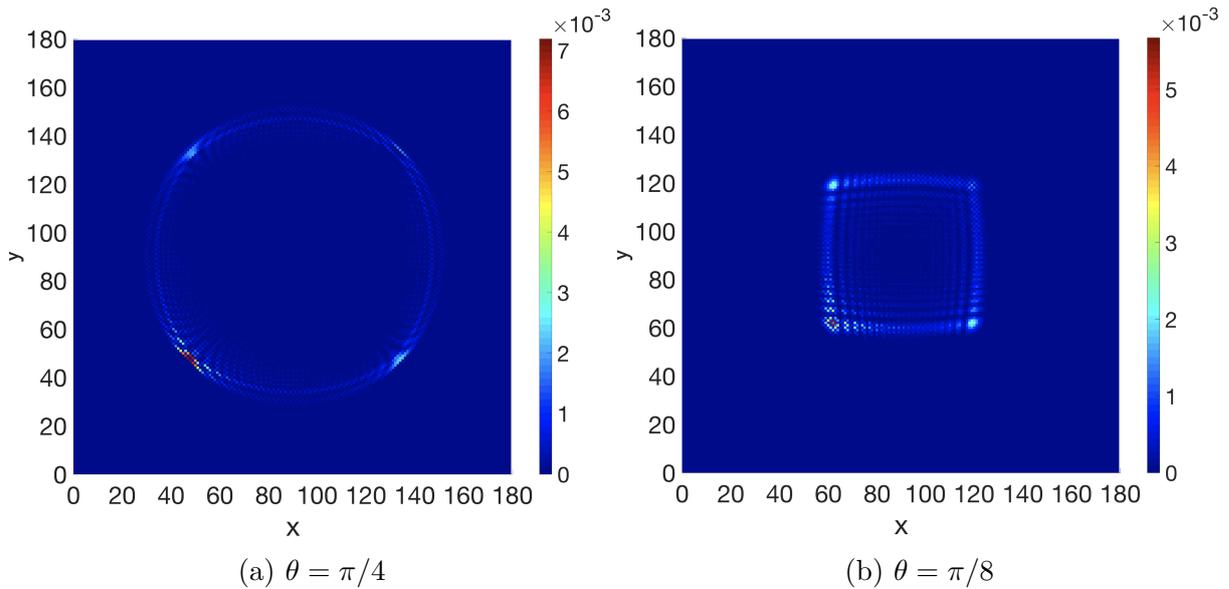


Figura 7 – Distribuição de probabilidade em grade bidimensional  $180 \times 180$  após 43 passos considerando dois ângulos  $\theta$  distintos.

O desvio padrão para para o caso bidimensional leva em consideração o deslocamento nas direções  $x$  e  $y$ . Portanto, temos o desvio nas duas direções dados por

$$\sigma_x = \sqrt{\sum_x (x - \mu_x)^2 p(x, y, t)} \quad \text{e} \quad \sigma_y = \sqrt{\sum_y (y - \mu_y)^2 p(x, y, t)} \quad (2.33)$$

onde  $\mu_x$  e  $\mu_y$  são as médias em cada direção dadas pelas expressões

$$\mu_x = \sqrt{\sum_x xp(x)} \quad \text{e} \quad \mu_y = \sqrt{\sum_y yp(y)}, \quad (2.34)$$

e as probabilidades associadas no espaço e tempos que usamos são descritas por

$$p(x, y, t) = |\langle x, y | \psi(t) \rangle|^2 \quad (2.35)$$

e

$$p(x) = \sum_y p(x, y, t) \quad \text{e} \quad p(y) = \sum_x p(x, y, t). \quad (2.36)$$

O desvio padrão total será uma distância euclidiana, no trabalho de [Santos, Portugal e Boettcher \(2015\)](#) chamado de deslocamento total médio, sendo dado por

$$\sigma = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2} \quad (2.37)$$

e que para o caso da grade bidimensional é conforme a figura 8. Esta figura mostra que o maior desvio acontece quando  $\theta = \pi/4$  e no artigo de [Fernandes e Portugal \(2016\)](#) os autores mostram que o problema de busca possui a melhor performance para este ângulo.

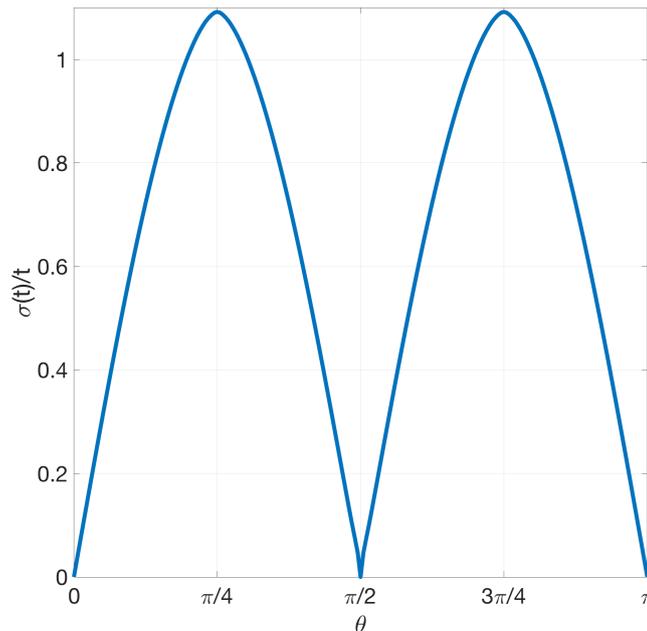


Figura 8 – Desvio padrão em função de  $\theta$  na grade bidimensional.

## 2.4 Equivalências e Inclusões das Caminhadas

Esta pequena seção será pra mostrar que o modelo de caminhadas quânticas escalonadas (CQE) é bastante geral em comparação ao modelo de Szegedy. Apresentamos, portanto, duas proposições contidas no trabalho de [Portugal et al. \(2016\)](#) para mostrar tais fatos. Além disso, no artigo de [Portugal, Oliveira e Moqadam \(2017\)](#) temos um diagrama que mostra certas inclusões de caminhadas e que reproduzimos na figura 9, onde  $X$  é matriz de Pauli,  $H$  de Hadamard e  $G$  de Grover.

A primeira proposição mostra em que condições a CQE é equivalente à caminhada de Szegedy. A segunda mostra um caso de inclusão, e que não vale a igualdade, onde certas instâncias da CQE não estão na caminhada de Szegedy.

**Proposição 1.** *Toda CQE com duas tesselas em que a interseção entre os polígonos delas possua no máximo um elemento é equivalente a uma caminhada quântica de Szegedy estendido em um grafo bipartido.*

**Proposição 2.** *Instâncias da CQE com duas tesselas, que possuem dois ou mais elementos em comum na interseção de elementos de tesselas distintas não são equivalentes a uma caminhada quântica de Szegedy.*

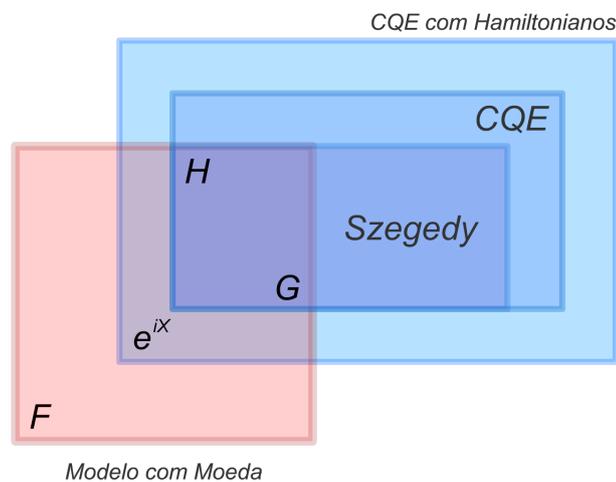


Figura 9 – Diagrama de inclusões das caminhadas quânticas

A segunda proposição nos leva ao próximo capítulo, onde analisaremos a CQE dentro de um grafo que não está na caminhada de Szegedy, pois viola a interseção de polígonos. Os resultados que seguem nos capítulos posteriores são inéditos na literatura de caminhadas quânticas.

### 3 Caminhada Quântica Escalonada em uma Grade de Cliques

Neste capítulo iremos analisar o grafo composto por  $n^2$  cliques de 8 vértices ( $K_8$ ) interligadas por  $2n^2$  cliques com 4 ( $K_4$ ). Construímos este grafo em uma topologia de toro, onde conectamos as cliques  $K_4$  superiores com as inferiores e as da extrema esquerda com as da direita. A tesselação deste grafo é dada pelos polígonos azuis e vermelhos que cobrem, respectivamente, as cliques de 8 e 4 vértices.

A motivação para o estudo deste grafo é que a Caminhada Quântica Escalonada (CQE) dentro dele não está contida nos passeios com moeda e de Szegedy. Este resultado de inclusão é parte do trabalho de [Portugal \(2016\)](#) e que analisamos no segundo capítulo desta tese.

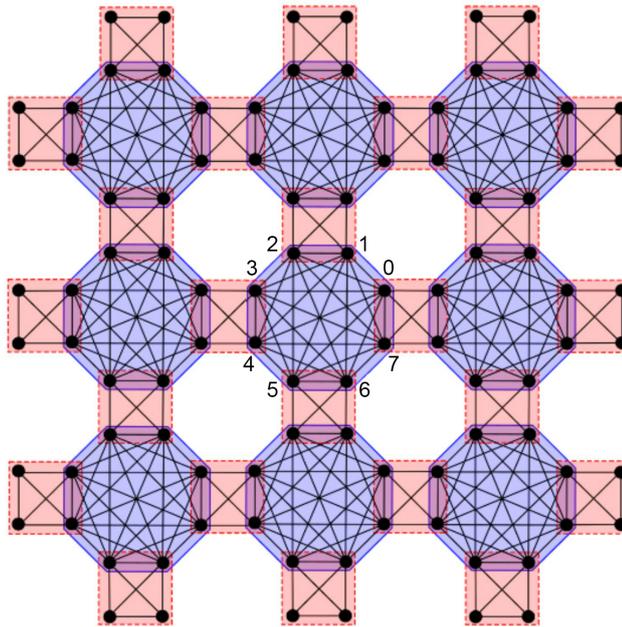


Figura 10 – Grafo com cliques de 8 vértices na tesselação em azul, 4 vértices na tesselação em vermelho e interligados. A geometria é de um tórus na fronteira.

O trajeto deste capítulo consiste em, primeiramente, construir os operadores de evolução para este grafo dentro do modelo de CQE. Posteriormente, faremos a análise de Fourier para este operador, observando as simetrias convenientes e tornando possível alguma análise. Por fim, faremos a análise após esta construção e decomposição.

### 3.1 Operadores de Evolução

A dimensão do espaço de Hilbert para nosso problema é  $N = 8n^2$ , sendo ele obtido numa espécie de grade com  $n$  por  $n$  cliques  $K_8$ . Definimos o operador de evolução  $U$  como o produto de dois operadores unitários  $U_0$  e  $U_1$  na ordem  $U = U_1U_0$ . O operador  $U_0$  induz a tesselação azul e  $U_1$  a tesselação vermelha. Dessa forma, o estado final do sistema será  $|\psi_t\rangle = U^t |\psi_0\rangle$ , onde  $t$  é o tempo de evolução e  $|\psi_0\rangle$  é o estado inicial, dado por

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \sum_{k=0}^7 |x, y\rangle |k\rangle. \quad (3.1)$$

Para a construção dos operadores  $U_0$  e  $U_1$ , associaremos um vetor em superposição uniforme para cada polígono. Os vetores associados aos polígonos azuis serão

$$|\alpha_{xy}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{k=0}^7 |x, y\rangle |k\rangle \quad (3.2)$$

e para os polígonos vermelhos

$$|\beta_{xy}^{(0)}\rangle = \frac{1}{2} |xy\rangle (|0\rangle + |7\rangle) + \frac{1}{2} |x+1, y\rangle (|3\rangle + |4\rangle), \quad (3.3)$$

$$|\beta_{xy}^{(1)}\rangle = \frac{1}{2} |xy\rangle (|1\rangle + |2\rangle) + \frac{1}{2} |x, y+1\rangle (|5\rangle + |6\rangle), \quad (3.4)$$

para  $0 \leq x, y \leq n-1$  e sendo dada em aritmética módulo  $n$  em  $|x, y\rangle$ .

Denotaremos que, para ambos os casos,  $x$  e  $y$  localizam alguma clique de 8 vértices e  $k$  os vértices dentro desta clique. A clique central poderá ser localizada em  $(x, y) = (0, 0)$ , mas como a geometria é de um tórus, qualquer clique de 8 vértices pode ser central. E, por fim, temos os operadores associados dados por

$$U_0 = 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\alpha_{xy}\rangle \langle \alpha_{xy}| - I \quad (3.5)$$

e

$$U_1 = 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} \left[ |\beta_{xy}^{(0)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(0)}| + |\beta_{xy}^{(1)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(1)}| \right] - I. \quad (3.6)$$

Podemos escrever esse passeio com Hamiltonianos da forma  $U = e^{i\theta_1 U_1} e^{i\theta_0 U_0}$ , porém iremos considerar  $\theta_0 = \theta_1 = \theta$  para mostrar a dinâmica desse passeio em experimentos numéricos. Portanto, utilizaremos a CQE com Hamiltonianos da forma

$$U = e^{i\theta U_1} e^{i\theta U_0}. \quad (3.7)$$

O primeiro experimento será para demonstrar a influência do ângulo  $\theta$  na CQE com Hamiltonianos. Consideraremos uma condição inicial na clique  $K_8$  central do grafo, sendo ela homogênea para todos os vértices. A figura 11 mostra como a distribuição de probabilidades se comporta quando alteramos o ângulo  $\theta$ , sendo  $\theta = \pi/2$  o caso  $U = U_1U_0$  a menos de uma fase.

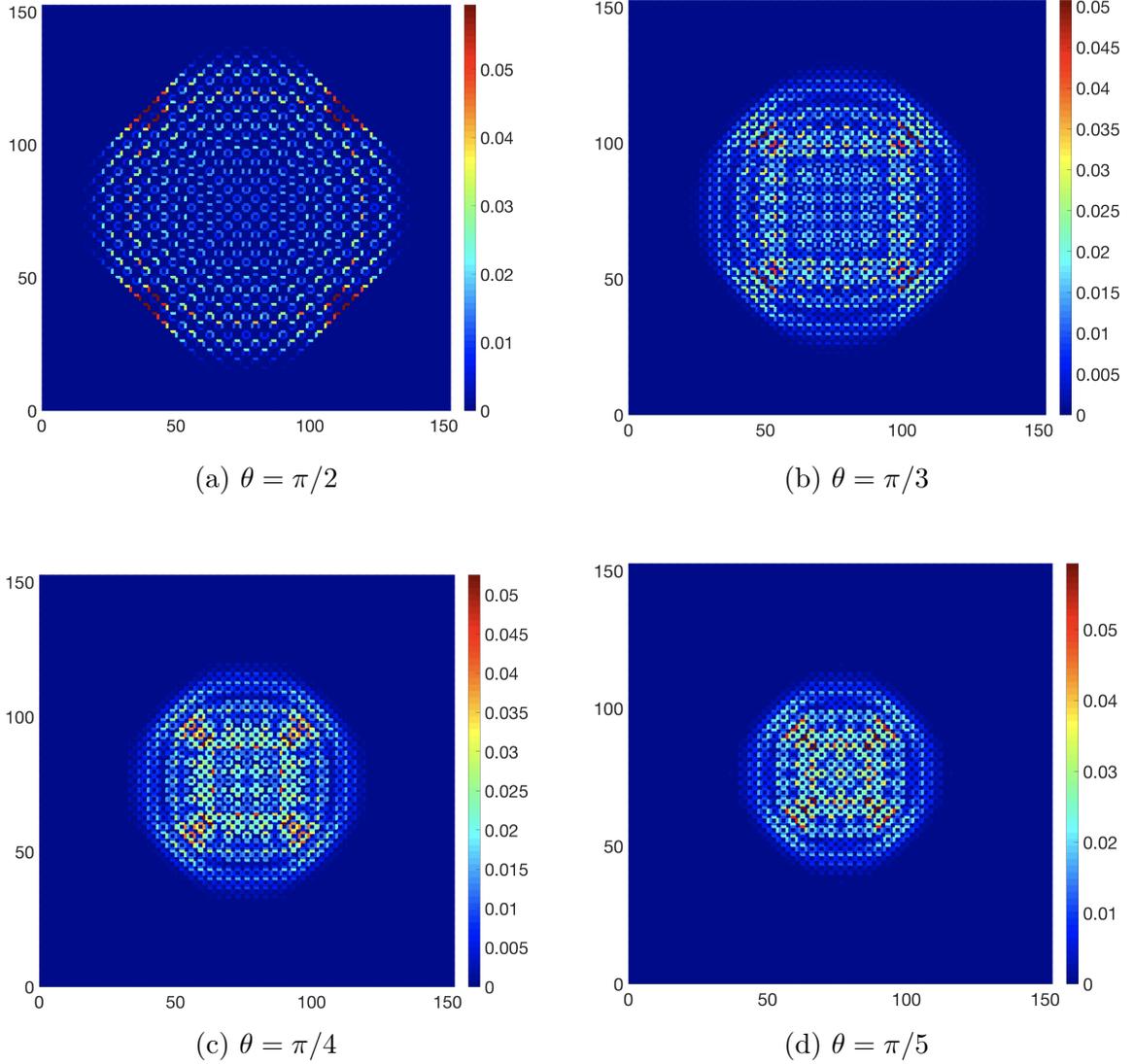


Figura 11 – Distribuição de probabilidade após 22 passos, variando o ângulo  $\theta$  nos hamiltonianos, para  $n = 45$ , em grade de cliques.

O próximo experimento visa mostrar a influência da condição inicial na distribuição de probabilidades da caminhada. Fixamos assim um ângulo  $\theta = \pi/2$  e escolhemos duas condições iniciais. A primeira condição inicial será uma superposição homogênea em quatro cliques  $K_8$  centralizadas e que formam um quadrado, cuja expressão é

$$|\psi_0^a\rangle = \frac{1}{\sqrt{32}} \sum_{k=0}^7 (|0,0\rangle + |1,0\rangle + |0,1\rangle + |1,1\rangle) |k\rangle. \quad (3.8)$$

A segunda condição inicial é semelhante à primeira, contudo alteramos a fase de uma

clique inteira, e que segue a equação

$$|\psi_0^b\rangle = \frac{1}{\sqrt{32}} \sum_{k=0}^7 (|0,0\rangle + |1,0\rangle + |0,1\rangle - |1,1\rangle) |k\rangle, \quad (3.9)$$

e as simulações seguem conforme a figura 12.

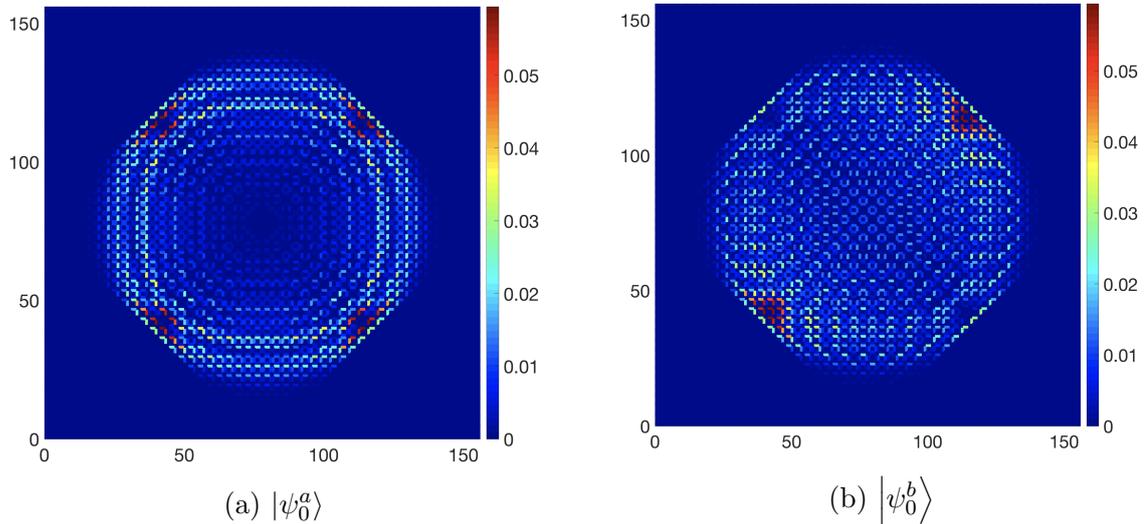


Figura 12 – Distribuição de probabilidade após 22 passos, para um ângulo  $\theta = \pi/2$  nos hamiltonianos, para  $n = 46$  na grade de cliques e variando a condição inicial.

Uma dificuldade para calcular o desvio padrão reside nas distâncias entre vértices que não são constantes dentro das cliques. Uma forma que podemos atacar o problema é condensando as probabilidades das cliques  $K_8$  e apenas um pontos e com isso construímos grade bidimensional. A figura 13 mostra a dinâmica fazendo esta última consideração e percebemos que mantemos os aspectos da dinâmica sem essa condensação.

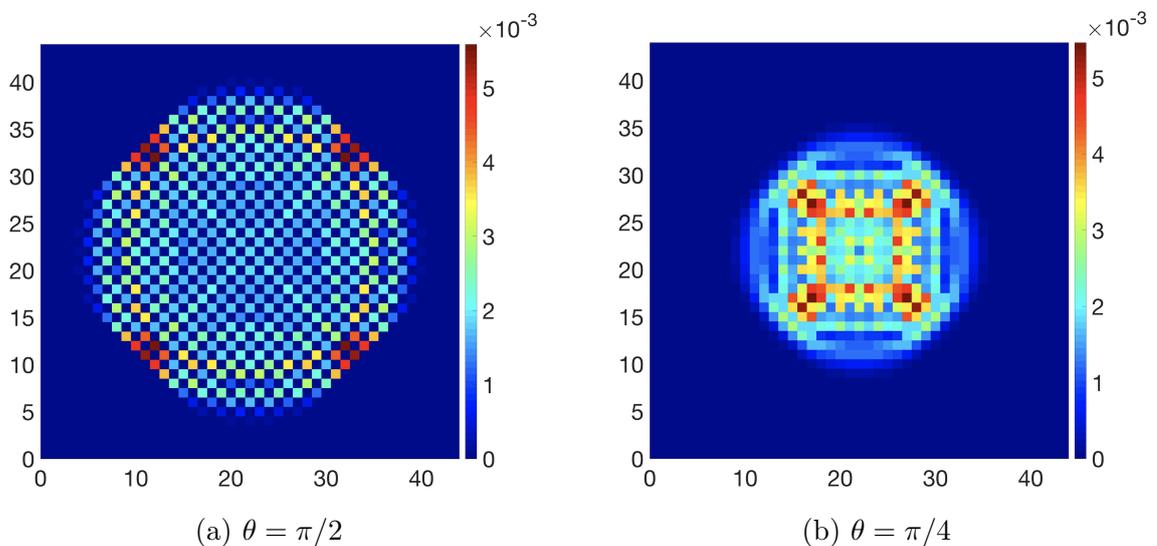


Figura 13 – Distribuição de probabilidade após 22 passos, variando o ângulo  $\theta$  nos hamiltonianos, para  $n = 45$ , em grade de cliques condensada.

O desvio padrão da grade de cliques, considerando essa condensação de probabilidades na clique  $K_8$ , será calculada como na grade bidimensional e segue como a figura 14 e está em  $\theta = \pi/2$ .

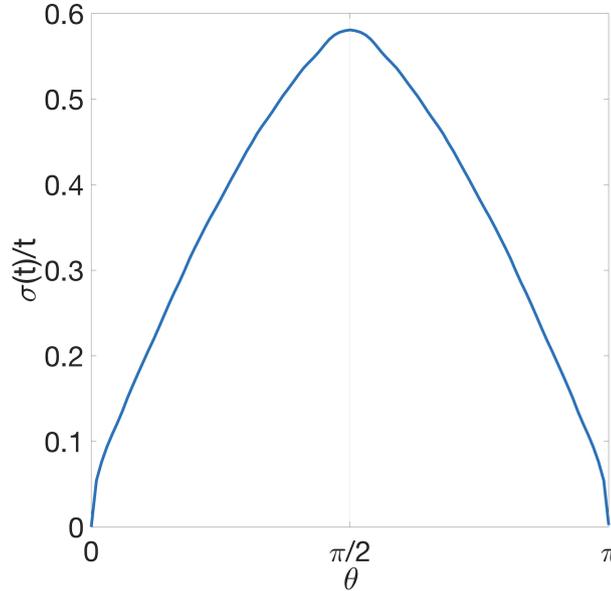


Figura 14 – Desvio padrão em comportamento assintótico para grade cliques condensada.

Quando temos em mãos um certo operador, queremos encontrar sua decomposição espectral para analisarmos toda sua dinâmica. Contudo, tendo em vista uma matriz que cresce de acordo com o número de vértices do grafo, este trabalho não seria possível sem algum tipo de simplificação ou redução. Nosso objetivo agora é de encontrar uma redução do operador  $U$  que simplifique os cálculos da decomposição espectral.

## 3.2 Bases de Fourier

O operador visto na base computacional cresce de acordo com o número de vértices, mas podemos escolher uma base reduzida onde isso não ocorra. Então faremos uma troca de base e escolheremos o que chamamos de bases de Fourier. As bases são escolhidas de acordo com cada grafo e explorando certas simetrias translacionais – dizendo que certos vértices são, em algum sentido, equivalentes.

Sendo então uma base  $B = \{|\psi_{k\ell}^p\rangle\}_{p=0}^m$ , quando aplicamos o operador  $U$  em cada vetor de base teremos

$$U |\psi_{k\ell}^p\rangle = \sum_{i=0}^m \tilde{u}_{ip} |\psi_{k\ell}^i\rangle, \quad (3.10)$$

caso seja possível reescrever dessa forma. Se esta combinação linear for possível, iremos construir o espaço coluna da matriz reduzida  $\tilde{U}$  formada por cada  $\tilde{u}_{ip}$ . Portanto, o trabalho que teremos será de escolher, apropriadamente, bases de Fourier que isso seja possível,

pois estaremos encontrando uma matriz de ordem  $(m + 1) \times (m + 1)$  para decompormos espectralmente.

Nas secções seguintes apresentaremos as matrizes reduzidas e a decomposição espectral para duas bases distintas. Para um maior detalhe, deixamos o apêndice B com os cálculos que fizemos para encontrar tais matrizes.

### 3.3 Matriz Reduzida $8 \times 8$

A análise de Fourier parte de um princípio de simetria na própria estrutura do grafo. Observamos que há uma simetria translacional no grafo, ou seja, não há diferença entre qualquer clique de 8 vértices, faremos uma base respeitando essa observação. De forma mais precisa, mas sem entrar em detalhes, temos um automorfismo de grupos dentro do grafo. Quando fixamos um valor de  $p$  e variamos o par  $(x, y)$  que identifica cada clique  $K_8$  temos  $n^2$  vértices equivalentes. Portanto, o estado associado que nos permite fazer análise, tendo apenas 8 vértices distintos, será

$$|\psi_{k\ell}^p\rangle = \frac{1}{n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle |p\rangle \quad (3.11)$$

considerando  $\omega = e^{2\pi i/n}$ ,  $0 \leq k, \ell < n$  e  $p = 0, 1, \dots, 7$ .

Ao efeturamos  $U_0 |\psi_{k\ell}^p\rangle$ , para todo  $p$ , iremos encontrar um vetor que será combinação linear do vetores da nova base (de Fourier) e que constituem o espaço coluna da matriz reduzida. E, dessa forma, temos

$$\tilde{U}_0 = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -3 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -3 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -3 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -3 \end{bmatrix}$$

e da mesma forma para  $U_1$  encontramos

$$\tilde{U}_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & \omega^k & \omega^k & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & \omega^\ell & \omega^\ell & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & \omega^\ell & \omega^\ell & 0 \\ \omega^{-k} & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & \omega^{-k} \\ \omega^{-k} & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & \omega^{-k} \\ 0 & \omega^{-\ell} & \omega^{-\ell} & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & \omega^{-\ell} & \omega^{-\ell} & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \omega^k & \omega^k & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Uma vez encontrado o operador reduzido nessa nova base como  $\tilde{U} = \tilde{U}_1 \tilde{U}_0$ , devemos encontrar a sua decomposição espectral. A primeira parte da decomposição espectral é encontrada com  $k, \ell \neq 0$  e temos os autovetores associados associados aos autovalores  $+1$  e  $-1$ , respectivamente,

$$|v_{k,\ell}^{+1}\rangle = \frac{1}{4\sqrt{2} \operatorname{sen}(\theta/2)} \begin{bmatrix} \omega^k(\omega^\ell - 1) \\ \omega^\ell(1 - \omega^k) \\ \omega^\ell(1 - \omega^k) \\ 1 - \omega^\ell \\ 1 - \omega^\ell \\ \omega^k - 1 \\ \omega^k - 1 \\ \omega^k(\omega^\ell - 1) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad |v_{k,\ell}^{-1}\rangle = \frac{1}{4\sqrt{2} \cos(\theta/2)} \begin{bmatrix} -\omega^k(\omega^\ell + 1) \\ \omega^\ell(1 + \omega^k) \\ \omega^\ell(1 + \omega^k) \\ -1 - \omega^\ell \\ -1 - \omega^\ell \\ \omega^k + 1 \\ \omega^k + 1 \\ -\omega^k(\omega^\ell + 1) \end{bmatrix}. \quad (3.12)$$

Temos também dois autovetores associados aos autovalores  $e^{+i\theta}$  e  $e^{-i\theta}$

$$|v_{k,\ell}^{+\theta}\rangle = \frac{1}{4 \operatorname{sen}(\theta)} \begin{bmatrix} e^{-i\theta} - \omega^k \\ e^{-i\theta} - \omega^\ell \\ e^{-i\theta} - \omega^\ell \\ e^{-i\theta} - \omega^{-k} \\ e^{-i\theta} - \omega^{-k} \\ e^{-i\theta} - \omega^{-\ell} \\ e^{-i\theta} - \omega^{-\ell} \\ e^{-i\theta} - \omega^k \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad |v_{k,\ell}^{-\theta}\rangle = \frac{1}{4 \operatorname{sen}(\theta)} \begin{bmatrix} e^{i\theta} - \omega^k \\ e^{i\theta} - \omega^\ell \\ e^{i\theta} - \omega^\ell \\ e^{i\theta} - \omega^{-k} \\ e^{i\theta} - \omega^{-k} \\ e^{i\theta} - \omega^{-\ell} \\ e^{i\theta} - \omega^{-\ell} \\ e^{i\theta} - \omega^k \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

onde o valor de  $\theta$  que aparece na expressão do autovalor no fator de normalização é dado por

$$\cos \theta(k, \ell) = \frac{1}{2} \left( \cos \frac{2\pi k}{n} + \cos \frac{2\pi \ell}{n} \right). \quad (3.14)$$

Agora para o caso onde consideramos  $k, \ell = 0$  temos mais quatro pares de autovetores, sendo três associados ao autovalor  $+1$  e o outro ao  $-1$ . Com isso, temos que os autovetores assumem as igualdades

$$|v_{0,0}^{+1A}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |v_{0,0}^{+1B}\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |v_{0,0}^{+1C}\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad |v_{0,0}^{-1D}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Os autovetores que apresentamos até agora somam um total de  $4n^2$ . Como a dimensão do espaço é de tamanho  $8n^2$ , restam-nos mais  $4n^2$  a serem encontrados. Estes últimos estão todos associados ao autovalor  $+1$  e são dados por

$$|v_{k,\ell}^{+1(0)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad |v_{k,\ell}^{+1(1)}\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |v_{k,\ell}^{+1(2)}\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |v_{k,\ell}^{+1(3)}\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Por fim, encontramos toda a decomposição espectral e que é dada pela união dos conjuntos  $B1$ ,  $B2$  e  $B3$ , formando uma base ortonormal de autovetores para o operador de evolução

$$B1 = \left\{ |v_{k,\ell}^{+1}\rangle, |v_{k,\ell}^{-1}\rangle, |v_{k,\ell}^{+\theta}\rangle, |v_{k,\ell}^{-\theta}\rangle : 0 \leq k, \ell < n, (k, \ell) \neq (0, 0) \right\} \quad (3.15)$$

$$B2 = \left\{ |v_{0,0}^{+1A}\rangle, |v_{0,0}^{+1B}\rangle, |v_{0,0}^{+1C}\rangle, |v_{0,0}^{-1}\rangle \right\} \quad (3.16)$$

$$B3 = \left\{ |v_{k,\ell}^{+1(0)}\rangle, |v_{k,\ell}^{+1(1)}\rangle, |v_{k,\ell}^{+1(2)}\rangle, |v_{k,\ell}^{+1(3)}\rangle : 0 \leq k, \ell < n \right\} \quad (3.17)$$

### 3.4 Matriz Reduzida $4 \times 4$

Por um lado, poderíamos encerrar nossos cálculos na matriz reduzida anterior, já que conseguimos a decomposição espectral. Por outro lado, temos algumas perguntas que podemos fazer na seção anterior. A primeira, e mais natural, é se seria possível reduzir ainda mais o operador. Uma segunda pergunta seria se essa nova matriz reduzida nos daria mais informações sobre a dinâmica desse passeio. Escolheremos uma nova base partindo de duas observações equivalentes: *i*) os autovetores encontrados possuem certas redundâncias

nas componentes como, por exemplo, nas posições 1 e 8; *ii*) não há diferença explícita na dinâmica de certos vértices dentro de cada clique octogonal.

De certo modo, há uma invariância em  $(0, 7)$ ,  $(1, 2)$ ,  $(3, 4)$  e  $(5, 6)$  para cada clique octogonal fixada em  $(x, y)$ . A redução do operador de evolução para uma matriz  $4 \times 4$  utiliza, portanto, as bases

$$|\psi_{k,\ell}^0\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|0\rangle + |7\rangle) \quad (3.18)$$

$$|\psi_{k,\ell}^1\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|3\rangle + |4\rangle) \quad (3.19)$$

$$|\psi_{k,\ell}^2\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|1\rangle + |2\rangle) \quad (3.20)$$

$$|\psi_{k,\ell}^3\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|5\rangle + |6\rangle) \quad (3.21)$$

onde  $n$  corresponde ao número de cliques de 8 vértices (horizontal ou vertical),  $\omega = e^{2\pi i/n}$  e  $0 \leq k, \ell < n$ . E para essa base, temos que as matrizes reduzidas são

$$\tilde{U}_0 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \tilde{U}_1 = \begin{bmatrix} 0 & \omega^k & 0 & 0 \\ \omega^{-k} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega^\ell \\ 0 & 0 & \omega^{-\ell} & 0 \end{bmatrix}$$

A dimensão do problema é  $N = 8n^2$ , pois temos  $n^2$  cliques de 8 vértices. Dessa forma, temos que encontrar  $8n^2$  autovetores associados aos seus respectivos autovalores. Abaixo teremos os autovetores da matriz reduzida.

Para  $k, \ell \neq 0$  temos o autovetor associado ao autovalor  $+1$

$$|v_{k,\ell}^{+1}\rangle = \frac{1}{4 \operatorname{sen}(\theta/2)} \begin{bmatrix} \omega^k(\omega^\ell - 1) \\ 1 - \omega^\ell \\ \omega^\ell(1 - \omega^k) \\ \omega^k - 1 \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

o autovetor associado ao autovalor  $-1$

$$|v_{k,\ell}^{-1}\rangle = \frac{1}{4 \cos(\theta/2)} \begin{bmatrix} -\omega^k(\omega^\ell + 1) \\ -1 - \omega^\ell \\ \omega^\ell(1 + \omega^k) \\ \omega^k + 1 \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

um autovetor associado ao autovalor  $e^{+i\theta}$

$$|v_{k,\ell}^{+\theta}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}\text{sen}(\theta)} \begin{bmatrix} e^{-i\theta} - \omega^k \\ e^{-i\theta} - \omega^{-k} \\ e^{-i\theta} - \omega^\ell \\ e^{-i\theta} - \omega^{-\ell} \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

um autovetor associado ao autovalor  $e^{-i\theta}$

$$|v_{k,\ell}^{-\theta}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}\text{sen}(\theta)} \begin{bmatrix} e^{i\theta} - \omega^k \\ e^{i\theta} - \omega^{-k} \\ e^{i\theta} - \omega^\ell \\ e^{i\theta} - \omega^{-\ell} \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

onde extraímos o valor de  $\theta$  como

$$\cos\theta(k, \ell) = \frac{1}{2} \left( \cos \frac{2\pi k}{n} + \cos \frac{2\pi \ell}{n} \right) \quad (3.26)$$

Quando  $k, \ell = 0$ , temos três autovetores associados ao autovalor  $+1$

$$|v_{0,0}^{+1A}\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |v_{0,0}^{+1B}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |v_{0,0}^{+1C}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad (3.27)$$

e um autovetor associado ao autovalor  $-1$

$$|v_{0,0}^{-1D}\rangle = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (3.28)$$

Os autovetores que apresentamos somam um total de  $4n^2$  e agora nos faltam mais  $4n^2$ . Estes outros, sendo válidos para todo  $k$  e  $\ell$ , e todos associados ao autovalor  $+1$ , são dados por

$$|v_{k,\ell}^{+1(0)}\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|0\rangle - |7\rangle), \quad (3.29)$$

$$|v_{k,\ell}^{+1(1)}\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|3\rangle - |4\rangle), \quad (3.30)$$

$$|v_{k,\ell}^{+1(2)}\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|1\rangle - |2\rangle), \quad (3.31)$$

$$|v_{k,\ell}^{+1(3)}\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|5\rangle - |6\rangle). \quad (3.32)$$

A união dos conjuntos  $B1$ ,  $B2$  e  $B3$  formam uma base ortonormal de autovetores para o operador de evolução

$$B1 = \left\{ \left| v_{k,\ell}^{+1} \right\rangle, \left| v_{k,\ell}^{-1} \right\rangle, \left| v_{k,\ell}^{+\theta} \right\rangle, \left| v_{k,\ell}^{-\theta} \right\rangle : 0 \leq k, \ell < n, (k, \ell) \neq (0, 0) \right\}, \quad (3.33)$$

$$B2 = \left\{ \left| v_{0,0}^{+1A} \right\rangle, \left| v_{0,0}^{+1B} \right\rangle, \left| v_{0,0}^{+1C} \right\rangle, \left| v_{0,0}^{-1} \right\rangle \right\}, \quad (3.34)$$

$$B3 = \left\{ \left| v_{k,\ell}^{+1(0)} \right\rangle, \left| v_{k,\ell}^{+1(1)} \right\rangle, \left| v_{k,\ell}^{+1(2)} \right\rangle, \left| v_{k,\ell}^{+1(3)} \right\rangle : 0 \leq k, \ell < n \right\}. \quad (3.35)$$

Para concluirmos esta seção, temos a tabela abaixo que representa a decomposição espectral do operador  $U$  feita a partir da matriz reduzida desta seção. Faremos depois um fechamento, a priori, deste problema com base em outro problema.

Autovalor	Autovetor	(k,l)
+1	$\left  v_{k,\ell}^{+1} \right\rangle$	$0 \leq k, \ell \leq n - 1, (k, \ell) \neq (0, 0)$
-1	$\left  v_{k,\ell}^{-1} \right\rangle$	$0 \leq k, \ell \leq n - 1, (k, \ell) \neq (0, 0)$
$e^{+i\theta}$	$\left  v_{k,\ell}^{+\theta} \right\rangle$	$0 \leq k, \ell \leq n - 1, (k, \ell) \neq (0, 0)$
$e^{-i\theta}$	$\left  v_{k,\ell}^{-\theta} \right\rangle$	$0 \leq k, \ell \leq n - 1, (k, \ell) \neq (0, 0)$
+1	$\left  v_{0,0}^{+1A} \right\rangle$	$(k, \ell) = (0, 0)$
+1	$\left  v_{0,0}^{+1B} \right\rangle$	$(k, \ell) = (0, 0)$
+1	$\left  v_{0,0}^{+1C} \right\rangle$	$(k, \ell) = (0, 0)$
-1	$\left  v_{0,0}^{-1D} \right\rangle$	$(k, \ell) = (0, 0)$
+1	$\left  v_{k,\ell}^{+1(0)} \right\rangle$	$0 \leq k, \ell \leq n - 1$
+1	$\left  v_{k,\ell}^{+1(1)} \right\rangle$	$0 \leq k, \ell \leq n - 1$
+1	$\left  v_{k,\ell}^{+1(2)} \right\rangle$	$0 \leq k, \ell \leq n - 1$
+1	$\left  v_{k,\ell}^{+1(3)} \right\rangle$	$0 \leq k, \ell \leq n - 1$

Tabela 1 – Decomposição espectral do operador  $U$  para a grade de cliques.

### 3.5 Resultados e Análise

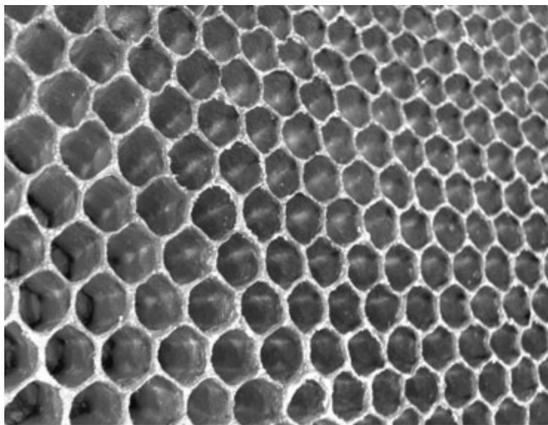
A decomposição espectral deste grafo que analisamos é semelhante à grade bidimensional na caminhada quântica com moeda como descrito por [Portugal \(2018\)](#). O que este grafo tem de diferente nesta decomposição é a inclusão de autovalores  $\pm 1$  e seus autovetores associados. Dessa forma, estes autovalores não acrescentam muitas mudanças na dinâmica do passeio, como podemos até notar nas simulações deste capítulo. Um problema que fica em aberto, já que temos a inserção de autovalores  $\pm 1$ , é o fenômeno de localização e que está associado a esses autovalores.

Uma outra questão a se notar é que a interseção dos polígonos pode ser generalizada, podendo expandir para mais vértices. Assim como nossa análise da matriz  $4 \times 4$ , iremos

sempre colocar os vértices em superposição para termos uma matriz reduzida desta mesma dimensão. Esta questão foi analisada no trabalho de Santos (2018) fazendo desta forma. A conclusão deste trabalho, como previsto, é que esta interção produz os autovalores  $\pm 1$  na decomposição espectral.

## 4 Caminhada Quântica Escalonada em Grade Hexagonal

Há um livro bastante interessante de [Ball \(2009\)](#) que mostra como certos padrões emergem da natureza. Neste mesmo livro também há um capítulo em que o autor destaca o padrão hexagonal que aparece em colmeias de abelhas e que ele chama de *lattice* – ao longo do texto iremos chamar de grade. Por forças físicas, quando colocamos bolhas em contato elas tendem a assumir a forma estável com três paredes em contato. Se adicionarmos uma quarta bolha elas vão se rearranjar sempre nesse padrão e que se assemelha a uma grade hexagonal. Destacamos então que esse tipo de arranjo possui uma componente de estabilidade natural pelas forças físicas que simplesmente agem. São duas as ilustrações nesse livro mencionado, e que dispomos na figura 15, que mostram como padrões hexagonais podem emergir de bolhas. Queremos dizer que essa estabilidade estrutural que aparece de forma natural pode ser utilizada em aplicações sintetizadas.



(a) Padrão hexagonal em uma colmeia de abelhas



(b) Bolhas dispostas lado a lado

Figura 15 – Relação entre padrões que emergem na natureza e forças físicas – [Ball \(2009\)](#).

Podemos sintetizar algumas estruturas em grade hexagonal através de carbonos: grafenos, fulerenos e microtubos de carbono, todos eles nessa mesma estrutura. Na figura 16 temos o esquema do fulereno extraído do trabalho de [Mintmire, Dunlap e White \(1992\)](#), sendo uma estrutura composta por carbonos em disposição hexagonal. No trabalho de [Pakdel et al. \(2012\)](#) temos essa mesma estrutura só que formada por átomos boro e nitrogênio, chamado de nitreto de boro. Dissemos na introdução desse texto que esse arranjo possui certas qualidades de condutividade e que, de certa forma, irão aparecer ao longo deste trabalho mas no escopo de CQE.

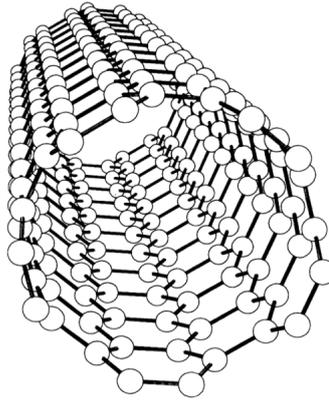


Figura 16 – Tubo de fulereno – [Mintmire, Dunlap e White \(1992\)](#).

A estrutura deste capítulo segue o que já fizemos ao longo da tese. Na primeira seção iremos construir o operador de evolução com hamiltonianos, através das tesselações, para a CQE em grade hexagonal e faremos algumas simulações para ilustrar sua dinâmica. A segunda seção será a decomposição espectral para esta caminhada e que faremos para um ângulo genérico nos hamiltonianos, a menos de uma restrição, cálculo este não antes encontrado na literatura. Com base nessa decomposição, faremos na terceira seção uma análise do fenômeno de localização neste grafo, sendo demonstrada analiticamente sua ausência. A quarta seção tem a finalidade de analisar, através de experimentos numéricos, em que ângulo temos o maior desvio padrão. A última seção é sobre o problema de busca neste grafo e que demonstramos sua performance, sendo que o ângulo que tem a melhor performance coincide com o maior desvio padrão. Todos os resultados desse capítulo estão na publicação de [Chagas et al. \(2018\)](#)

## 4.1 Operador de Evolução

Podemos construir a grade hexagonal, conforme temos na figura 17, através de três vetores:  $\vec{e}_x$ ,  $\vec{e}_y$  e  $\vec{r}$ . Os vetores  $\vec{e}_x$  e  $\vec{e}_y$  constroem uma grade bidimensional inclinada, representados por pontos abertos; enquanto que  $\vec{r}$  completa o hexágono com as devidas arestas, dado pelos pontos fechados. Portanto, a posição de cada nó da grade hexagonal segue a relação

$$(x, y, p) = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + p\vec{r} \quad (4.1)$$

sendo que

$$\vec{r} = \frac{1}{3}(\vec{e}_x + \vec{e}_y) \quad (4.2)$$

onde  $0 \leq x, y < n$  e  $p = 0, 1$ , onde  $n$  é um número ímpar de hexágonos nas direções de  $x$  e  $y$ . Consideraremos a geometria de um toro e, dessa forma, a dimensão do espaço será  $N = 2n^2$ . Ressaltamos aqui que o vetor  $\vec{r}$  será unitário nas análises de desvio padrão, isso para manter a noção de distância unitária entre os vértices.

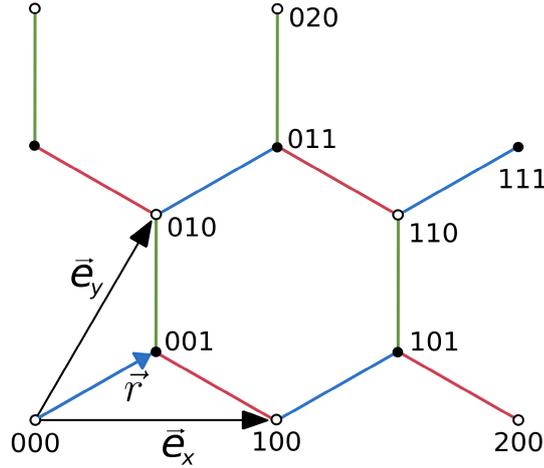


Figura 17 – A figura mostra uma pequena parte da grade hexagonal. Os vetores  $\vec{e}_x$  e  $\vec{e}_y$  são mostrados em preto e os vetores  $\vec{r}$  em azul. A condição de fronteira é de um toro seguindo as direções  $\vec{e}_x$  e  $\vec{e}_y$ . Os vértices são identificados por  $(x, y, p)$ , onde  $p = 0$  denota vértices vazios e  $p = 1$  vértices cheios. As tesselações são representadas nas cores vermelho, verde e azul.

Para este grafo utilizaremos três tesselações denotadas por  $\mathcal{T}_\alpha$ ,  $\mathcal{T}_\beta$  e  $\mathcal{T}_\gamma$  nas cores vermelho, verde e azul, respectivamente. Essas tesselações são descritas pelos conjuntos como

$$\mathcal{T}_\alpha = \left\{ \{(x, y, 1), (x + 1, y, 0)\} : 0 \leq x, y < n \right\}, \quad (4.3)$$

$$\mathcal{T}_\beta = \left\{ \{(x, y, 1), (x, y + 1, 0)\} : 0 \leq x, y < n \right\}, \quad (4.4)$$

$$\mathcal{T}_\gamma = \left\{ \{(x, y, 0), (x, y, 1)\} : 0 \leq x, y < n \right\}, \quad (4.5)$$

onde utilizamos aritmética módulo  $n$  para obtermos a condição de fronteira de um toro. Repare que cada tesselação cobre todos os vértices e juntas recobrem todas as arestas do grafo. Dessa forma, as tesselações induzem os estados

$$\begin{aligned} |\alpha_{x,y}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |x, y, 1\rangle + |x + 1, y, 0\rangle \right), \\ |\beta_{x,y}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |x, y, 1\rangle + |x, y + 1, 0\rangle \right), \\ |\gamma_{x,y}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |x, y, 0\rangle + |x, y, 1\rangle \right), \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde  $0 \leq x, y < n$  e, através desses estados, temos os operadores

$$\begin{aligned} H_\alpha &= 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\alpha_{x,y}\rangle \langle \alpha_{x,y}| - I, \\ H_\beta &= 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\beta_{x,y}\rangle \langle \beta_{x,y}| - I, \\ H_\gamma &= 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\gamma_{x,y}\rangle \langle \gamma_{x,y}| - I, \end{aligned} \quad (4.7)$$

sendo cada um deles operadores de reflexão nos subespaços gerados pelos estados associados. Por fim, temos o operador para a CQE com hamiltonianos na grade hexagonal como

$$U = e^{i\theta H_\gamma} e^{i\theta H_\beta} e^{i\theta H_\alpha}, \quad (4.8)$$

onde  $\theta \in [0, 2\pi]$  é um ângulo.

O primeiro experimento, conforme figura 18, mostra a sensibilidade da dinâmica da caminhada mediante a condição inicial. Para mostrar esse fato temos a condição inicial dentro de um hexágono central

$$|\psi_0^a\rangle = \frac{1}{2}(|1, 1, 0\rangle + |1, 0, 1\rangle + |0, 0, 1\rangle + |0, 1, 0\rangle) \quad (4.9)$$

e um segunda condição em apenas uma aresta como

$$|\psi_0^b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1, 0\rangle + |1, 0, 1\rangle) \quad (4.10)$$

e que modificam substancialmente a dinâmica do sistema.

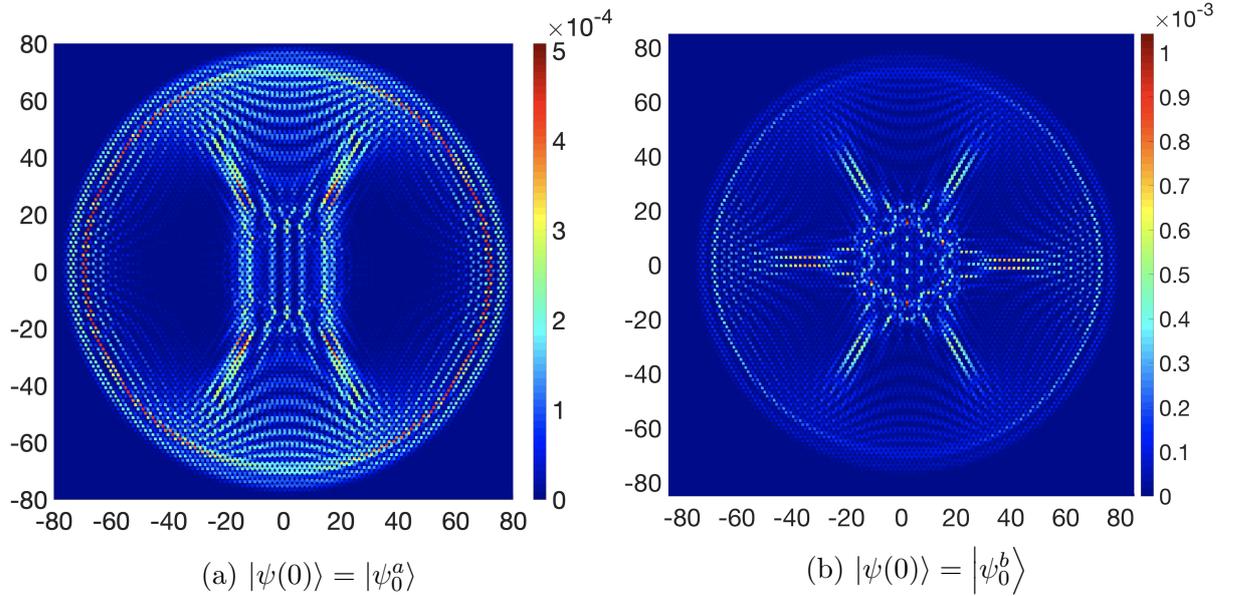


Figura 18 – Distribuição de probabilidade em grade hexagonal com  $n = 121$ , após 58 passos, utilizando duas condições iniciais distintas, considerando  $\theta = \pi/3$ .

O segundo experimento visa mostrar a dependência do ângulo com relação ao espalhamento, assim o desvio padrão, do sistema. Para tal, consideramos a condição inicial

$$|\psi_0^c\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1, 1, 0\rangle + |1, 0, 1\rangle + |1, 0, 0\rangle + |0, 0, 1\rangle + |0, 1, 0\rangle + |0, 1, 1\rangle) \quad (4.11)$$

e variamos o ângulo  $\theta$ , e o efeito é ilustrado na figura 19. Posteriormente, analisaremos com maior cuidado essa relação do ângulo com o desvio padrão.

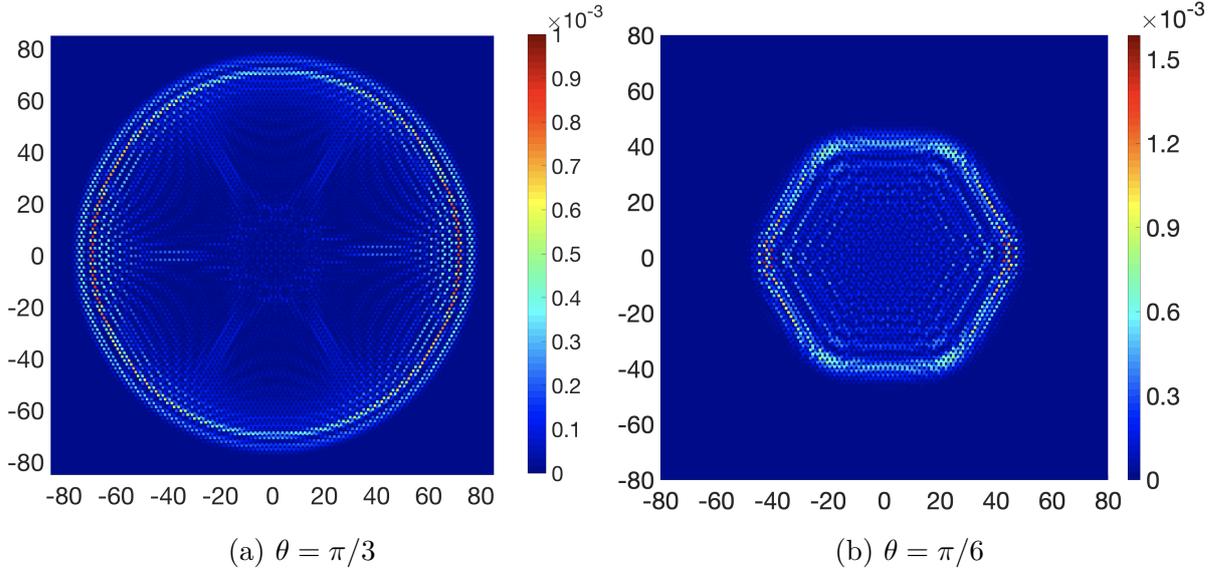


Figura 19 – Distribuição de probabilidade em grade hexagonal com  $n = 121$ , após 58 passos, utilizando ângulos distintos e condição inicial  $|\psi(0)\rangle = |\psi_0^a\rangle$ .

## 4.2 Análise de Fourier

Da mesma forma que analisamos a grade de cliques por certas simetrias translacionais, iremos fazer o mesmo aqui. A questão translacional acontece justamente sobre os vértices abertos ou fechados, e dessa forma construímos as bases como

$$|\psi_{k\ell}^0\rangle = \frac{1}{n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |x, y, 0\rangle, \quad (4.12)$$

$$|\psi_{k\ell}^1\rangle = \frac{1}{n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |x, y, 1\rangle, \quad (4.13)$$

onde  $\omega = e^{2\pi i/n}$ ,  $0 \leq k, \ell \leq n-1$ . Os vetores  $|\psi_{k\ell}^0\rangle$  e  $|\psi_{k\ell}^1\rangle$  para todo  $k, \ell$  formam uma base de Fourier ortonormal para  $\mathcal{H}^N$ .

Devemos agora aplicar cada um dos vetores da nova base no operador, tendo como objetivo reescrevê-lo nessa nova base. Nessas aplicações, escreveremos essas combinações lineares como

$$U |\psi_{k\ell}^0\rangle = A_{k\ell} |\psi_{k\ell}^0\rangle - B_{k\ell}^* |\psi_{k\ell}^1\rangle, \quad (4.14)$$

$$U |\psi_{k\ell}^1\rangle = B_{k\ell} |\psi_{k\ell}^0\rangle + A_{k\ell}^* |\psi_{k\ell}^1\rangle, \quad (4.15)$$

e a matriz reduzida será dada por

$$\tilde{U}_{k\ell} = \begin{bmatrix} A_{k\ell} & B_{k\ell} \\ -B_{k\ell}^* & A_{k\ell}^* \end{bmatrix}$$

cujas entradas dessa matriz serão escrita, com a finalidade de simplificação, como

$$A_{k\ell} = (a_{k\ell} + i b_{k\ell}) \cos \theta, \quad (4.16)$$

$$B_{k\ell} = (c_{k\ell} + i d_{k\ell}) \sin \theta, \quad (4.17)$$

onde os termos da equação anterior são dados por

$$a_{k\ell} = -f_{k\ell} \sin^2 \theta + \cos^2 \theta, \quad (4.18)$$

$$b_{k\ell} = -g_{k\ell} \sin^2 \theta, \quad (4.19)$$

$$c_{k\ell} = b_{k\ell} + \sin \tilde{k} + \sin \tilde{\ell}, \quad (4.20)$$

$$d_{k\ell} = a_{k\ell} + \cos \tilde{k} + \cos \tilde{\ell}, \quad (4.21)$$

considerando que

$$f_{k\ell} = \cos \tilde{k} + \cos \tilde{\ell} + \cos(\tilde{k} - \tilde{\ell}), \quad (4.22)$$

$$g_{k\ell} = \sin \tilde{k} + \sin \tilde{\ell} + \sin(\tilde{k} - \tilde{\ell}) \quad (4.23)$$

notando ainda que reparametrizamos as variáveis  $k$  e  $\ell$  por  $\tilde{k} = 2\pi k/n$  and  $\tilde{\ell} = 2\pi \ell/n$ . Os cálculos da decomposição espectral dessa grade estão no apêndice C desta tese.

Reescrever o operador em uma base bidimensional, considerando cada valor de  $k$  e  $\ell$ , simplifica toda a análise da dinâmica do sistema. A decomposição é dada tal que os autovalores do operador reduzido  $\tilde{U}_{k\ell}$  são  $e^{\pm i\phi_{k\ell}}$ , onde  $\cos \phi_{k\ell} = a_{k\ell} \cos \theta$ . Os autovetores associados são

$$|v_{k\ell}^{\pm\phi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\gamma^{\pm}}} \begin{bmatrix} B_{k\ell} \\ e^{\pm i\phi_{k\ell}} - A_{k\ell} \end{bmatrix}, \quad (4.24)$$

onde o termo que aparece na normalização é dado por

$$\gamma^{\pm} = 2 - 2(a_{k\ell} \cos \phi_{k\ell} \pm b_{k\ell} \sin \phi_{k\ell}) \cos \theta. \quad (4.25)$$

Ainda podemos notar que para  $\theta = \pi/3$  e  $(k, \ell) = (0, 0)$  temos um caso degenerado, onde  $\gamma^{\pm} = 0$ . Neste caso, os autovetores normalizados são  $|v_{00}^{\pm\phi}\rangle = |\pm\rangle$ .

Por fim, podemos escrever uma base completa para o operador  $U$ , segunda a nova base para a matriz reduzida. Os autovalores e autovetores de  $\tilde{U}_{k\ell}$  induzem os mesmos para o operador  $U$ . Dessa forma temos os autovalores  $e^{\pm i\phi_{k\ell}}$ , onde  $\cos \phi_{k\ell} = a_{k\ell} \cos \theta$ , com autovetores associados

$$|\psi_{k\ell}^{\pm\phi}\rangle = \langle 0 | v_{k\ell}^{\pm\phi} \rangle |\psi_{k\ell}^0\rangle + \langle 0 | v_{k\ell}^{\pm\phi} \rangle |\psi_{k\ell}^1\rangle = \frac{B_{k\ell}}{\sqrt{\gamma^{\pm}}} |\psi_{k\ell}^0\rangle + \frac{e^{\pm i\phi_{k\ell}} - A_{k\ell}}{\sqrt{\gamma^{\pm}}} |\psi_{k\ell}^1\rangle, \quad (4.26)$$

para  $0 \leq k, \ell < n$ .

### 4.3 Localização

Nesta seção iremos analisar o fenômeno de localização em caminhadas quânticas. Podemos entender este fenômeno como um caminhante que fica preso em uma condição inicial, isto é, uma probabilidade que não decai a zero conforme o tempo avança. As primeiras simulações que mostram este fenômeno aparecem com [Mackay et al. \(2002\)](#) estudando o problema bidimensional em uma caminhada com Grover. Posteriormente, temos outras simulações com [Tregenna et al. \(2003\)](#) com diversas moedas. Uma análise mais rigorosa aparece no artigo de [Inui, Konishi e Konno \(2003\)](#) que, analiticamente, mostram a relação da localização com uma degeneração dos autovalores do operador de evolução. Em contraposição ao caso discreto temos que o caso contínuo não apresenta localização na reta – [Konno \(2002\)](#). Mencionamos ainda os trabalhos de [Inui, Konno e Segawa \(2005\)](#) analisando a caminhada na reta com moeda de três estados e [Banuls et al. \(2006\)](#) com moeda dependente do tempo. Este fenômeno de localização aparece na grade hexagonal na caminhada com moeda conforme mostram [Lyu, Yu e Wu \(2015\)](#). Mostraremos que a CQE na grade hexagonal não possui localização.

Definimos a localização em um vértice fixo  $(x, y, j)$  como uma probabilidade não nula que persiste conforme  $t$  avança, ignorando termos transientes. Dessa forma a localização acontece se

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\langle x, y, j | \psi(t) \rangle|^2 > 0 \quad (4.27)$$

considerando a dinâmica  $|\psi(t)\rangle = U^t |\psi(0)\rangle$ . Como demonstrado nos trabalhos que mencionamos, a localização está intimamente ligada aos autovalores. Portanto, escrevemos o operador de evolução segundo a decomposição espectral encontrada como

$$U^t = \sum_{k,\ell=0}^{n-1} e^{it\phi_{k\ell}} |\psi_{k\ell}^{+\phi}\rangle \langle \psi_{k\ell}^{+\phi}| + e^{-it\phi_{k\ell}} |\psi_{k\ell}^{-\phi}\rangle \langle \psi_{k\ell}^{-\phi}|. \quad (4.28)$$

Pela equação (4.26) podemos remontar parte da equação (4.27) como

$$\langle x, y, j | \psi(t) \rangle = \frac{1}{n} \sum_{k,\ell=0}^{n-1} \left( h_{k\ell}^{+j} e^{it\phi_{k\ell}} + h_{k\ell}^{-j} e^{-it\phi_{k\ell}} \right) \quad (4.29)$$

onde

$$h_{k\ell}^{\pm 0} = \frac{B_{k\ell} \omega^{kx+\ell y}}{\sqrt{\gamma^{\pm}}} \langle \psi_{k\ell}^{\pm\phi} | \psi(0) \rangle \quad (4.30)$$

e

$$h_{k\ell}^{\pm 1} = \frac{(e^{it\phi_{k\ell}} - A_{k\ell}) \omega^{kx+\ell y}}{\sqrt{\gamma^{\pm}}} \langle \psi_{k\ell}^{\pm\phi} | \psi(0) \rangle, \quad (4.31)$$

supondo que  $|\psi(0)\rangle$  é uma superposição de um número finito de vértices e que não depende de  $n$ .

Analisaremos a localização em grade hexagonal infinita e, portanto, iremos converter o somatório em integral da equação (4.29) quando  $n \rightarrow \infty$ . Assim, temos a conversão

$$\frac{1}{n} \sum_{k,\ell=0}^{n-1} \longrightarrow \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi}, \quad (4.32)$$

considerando  $\tilde{k} \rightarrow k$  e  $\tilde{\ell} \rightarrow \ell$ .

A versão bidimensional do método da fase-estacionária é expressa conforme o lema abaixo, seguindo a referência [Pemantle e Wilson \(2010\)](#).

**Lema 1.** Seja  $f, \phi : [-\pi, \pi]^2 \rightarrow \mathbb{C}$  funções analíticas. Assumimos que o conjunto de pontos críticos  $\Gamma$  de  $\phi$  é finito, e que a matriz hessiana  $H = [\partial^2 f / \partial k \partial \ell]$  em cada ponto em  $\Gamma$  é não-singular. Então

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(k, \ell) e^{\pm it \phi_{k\ell}} dk d\ell \sim \sqrt{\frac{1}{\pi t}} \sum_{(k_0, \ell_0) \in \Gamma} \frac{f(k_0, \ell_0) e^{\pm it \phi_{k_0 \ell_0}}}{\sqrt{\det H(k, \ell_0)}} \quad (4.33)$$

Aplicamos este lema fazendo  $f(k, \ell) = h_{k\ell}^{\pm j}$  e verificando quais são os pontos críticos de  $\phi(k, \ell)$ . Dessa forma, temos que

$$\frac{\partial \phi_{k\ell}}{\partial k} = \frac{\cos(\theta) \operatorname{sen}^2(\theta) [\operatorname{sen}(k - \ell) + \operatorname{sen}(k)]}{\operatorname{sen}(\phi_{k\ell})}, \quad (4.34)$$

$$\frac{\partial \phi_{k\ell}}{\partial \ell} = \frac{\cos(\theta) \operatorname{sen}^2(\theta) [\operatorname{sen}(\ell - k) + \operatorname{sen}(\ell)]}{\operatorname{sen}(\phi_{k\ell})}. \quad (4.35)$$

Então, existem oito pontos críticos em  $\Gamma$  que satisfazem  $\{(k, \ell) \in [-\pi, \pi] : \operatorname{sen}(k) + \operatorname{sen}(k - \ell) = \operatorname{sen}(\ell) + \operatorname{sen}(\ell - k) = 0\}$ . O determinante da matriz hessiana é

$$\det H(k, \ell) = \frac{\cos(\theta) \operatorname{sen}^2(\theta)}{\operatorname{sen}^2(k\ell)} \begin{vmatrix} \cos(k) + \cos(k - \ell) & -\cos(\phi_{k\ell}) - \cos(k - \ell) \\ -\cos(\phi_{k\ell}) - \cos(k - \ell) & \cos(\ell) + \cos(k - \ell) \end{vmatrix} \quad (4.36)$$

Verificamos que a matriz hessiana não é degenerada em qualquer ponto crítico. Dessa forma, nenhum vértice admite localização pois a taxa de decaimento do lado direito da equação (4.33) para cada vértice é  $\mathcal{O}(1/t)$

## 4.4 Desvio Padrão

Faremos aqui uma análise do desvio padrão nesta caminhada e que está diretamente ligado ao ângulo escolhido. Digamos que o desvio padrão seja dado por uma função  $\sigma(t)$  dependente do tempo e utilizaremos a probabilidade  $p(x, y, p, t)$ , sendo a probabilidade sobre cada vértice num tempo  $t$ . Como queremos um comportamento assintótico, iremos utilizar nas simulações  $n$  suficientemente grande para evitar flutuações e a distância entre os vértices será unitária, como descrito no vetor  $\vec{r}$  da figura 17.

Na primeira simulação evidenciamos a dependência linear do desvio padrão com relação ao tempo. Iremos utilizar o desvio total médio definido da equação 2.33 até 2.37 como  $\sigma = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2}$ , sendo  $\sigma = \sigma(t)$ . Fixamos alguns valores de  $\theta$  para verificar esse comportamento linear de  $\sigma(t)$  e também com relação aos ângulos onde  $\pi/3$  alcança o maior desvio, conforme figura 20. No segundo experimento queremos encontrar, de fato, o ângulo que produza o desvio padrão máximo possível. Para tanto, iremos medir  $\sigma(t)/t$  e

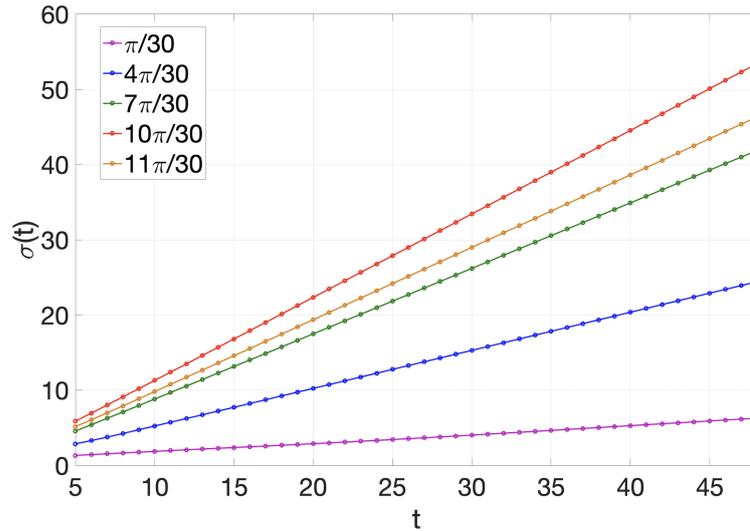


Figura 20 – Desvio padrão  $\sigma(t)$  para a grade hexagonal em função do tempo para  $\theta = \pi/30$ ,  $\theta = 4\pi/30$ ,  $\theta = 7\pi/30$ ,  $\theta = 10\pi/30$ ,  $\theta = 11\pi/30$ .

que irá eliminar a dependência do tempo para  $t$  suficientemente grande. Encontramos os pontos de máximo muito próximos dos ângulos  $\pi/3$  e  $2\pi/3$ , conforme a figura 21, e que coincidem com melhores ângulos no problema de busca.

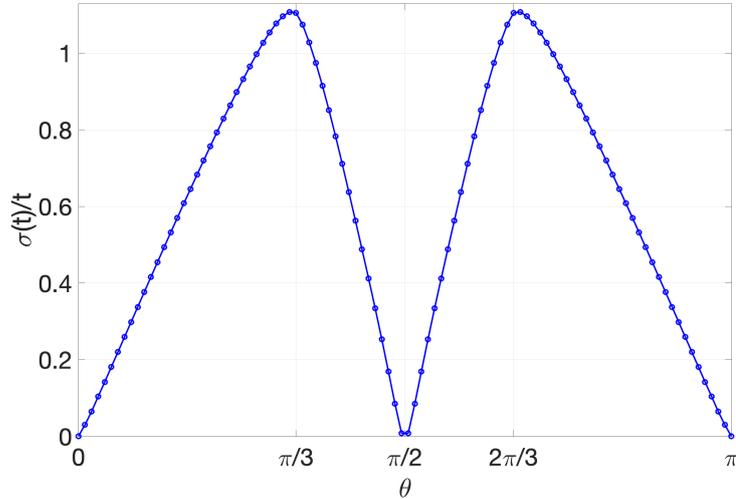


Figura 21 –  $\sigma(t)/t$  para a grade hexagonal como função de  $\theta$  para  $t$  suficientemente grande.

O desvio padrão nos dá indícios de qual ângulo optar no problema de busca, já que o espalhamento da distribuição de probabilidades tem uma certa correlação. A próxima seção tem o objetivo de mostrar que para  $\theta = \pi/3$  o problema de busca terá a melhor performance.

## 4.5 Problema de Busca

A última seção deste capítulo será sobre o problema de busca na grade hexagonal utilizando a CQE. Esta seção está repleta de detalhes técnicos em modificações e contas, então iremos enumerar em um fluxo que irá auxiliar na compreensão:

1. O problema de busca será para um elemento marcado nessa grade hexagonal e faremos uma modificação do operador  $U$ , onde utilizamos o oráculo de SKW que busca o elemento marcado – trabalho de [Shenvi, Kempe e Whaley \(2003\)](#);
2. Definimos uma condição inicial para iniciar a busca, sendo ela uniforme evitando qualquer viés;
3. Encontramos o ângulo  $\theta$  ótimo, sendo ele o que produz o autovalor de menor argumento positivo;
4. Esse autovalor será o que realmente importa na dinâmica e complexidade do algoritmo, como iremos demonstrar, e que aparecem nos trabalhos de [Portugal \(2018\)](#), [Ambainis, Kempe e Rivosh \(2004\)](#) e [Ambainis, Portugal e Nahimov \(2013\)](#);
5. Encontraremos a decomposição espectral do operador modificado e escreveremos o operador de evolução do problema de busca nessa base de autovetores;
6. Encontraremos a complexidade do algoritmos mediante os cálculos anteriores que é da ordem de  $\Theta(\sqrt{N \ln N})$ .

Modificaremos o operador  $U$  definido pela equação (4.8) através de um operador  $R_0$  que inverte o sinal do elemento marcado

$$\mathcal{U}_0 = U R_0 \quad (4.37)$$

sendo o operador unitário que marca o elemento  $(0, 0, 0)$ , sem perda de generalidade, descrito como

$$R_0 = I - 2 |0, 0, 0\rangle \langle 0, 0, 0|. \quad (4.38)$$

O oráculo descrito por  $R_0$  modifica apenas o sinal do elemento marcado, mas a condição inicial do sistema deve ser uniforme para evitar qualquer viés. Portanto, a condição inicial é descrita por

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}n} \sum_{x,y=0}^{n-1} (|x, y, 0\rangle + |x, y, 1\rangle). \quad (4.39)$$

O algoritmo de busca tem por finalidade aumentar a probabilidade de medição deste elemento marcado, conforme aplicamos o operador modificado  $\mathcal{U}_0$ . Dessa forma, temos que a evolução do sistema será

$$|\psi_t\rangle = \mathcal{U}_0^t |\psi_0\rangle \quad (4.40)$$

e  $t$  será o tempo de execução do algoritmo. O objetivo é de encontrar esse valor de  $t$  ótimo, então devemos também tratar de alguma estratégia que aprimore essa chance de sucesso e que veremos ao fim da seção.

Encontraremos o valor ótimo de  $\theta$  para a execução e análise do algoritmo. Por finalidade de simplificação de cálculos, iremos trocar o operador  $U$  por  $-U$ , esse sinal, dito fase global, não altera a medição final do sistema. Queremos encontrar o ângulo  $\theta$  que produza o autovalor de menor argumento de  $-U$ . Temos que os autovalores de  $-U$  são  $e^{\pm i(\pi + \phi_{k\ell})}$  e sabendo que

$$\cos \phi_{k\ell} = a_{k\ell} \cos \theta \quad (4.41)$$

cuja expansão assintótica de  $\cos \phi_{k\ell}$  é

$$\left(4 \cos^2 \theta - 3\right) \cos \theta + \frac{4 \pi^2 (k^2 - k\ell + \ell^2) \sin^2 \theta \cos \theta}{n^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^4}\right). \quad (4.42)$$

Chamaremos de  $\phi_{\min}$  o autovalor de menor argumento positivo de  $-U$ . A segunda parcela da soma na equação 4.41 deve ter  $(k, \ell) = (0, 1)$ , satisfazendo a condição sobre o autovalor. Por outro lado, o primeiro termo da soma na expansão deve ter  $\theta = \pi/3$ , considerando  $0 \leq \theta \leq \pi/2$ , para que  $\cos \phi_{k\ell}$  seja próximo de 1 e seu argumento de 0. Portanto, por estes cálculos e as definições nas equações 4.18 temos

$$\phi_{\min} = \frac{\sqrt{3}\pi}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^2}\right) \quad (4.43)$$

e fora dessas condições o problema de busca será tão lento quanto a caminhada clássica, seguindo a complexidade  $\Omega(N\ell nN)$ .

Agora iremos analisar o operador de busca  $\mathcal{U}_0$  e encontraremos sua decomposição. Diremos que  $e^{i\lambda}$  é o autovalor com menor argumento positivo para  $\mathcal{U}_0$  e que seu autovetor associado é  $|\lambda\rangle$ , tal que

$$\mathcal{U}_0 |\lambda\rangle = e^{i\lambda} |\lambda\rangle. \quad (4.44)$$

Como os vetores  $|\psi_{k\ell}^{\pm\phi}\rangle$  formam uma base ortonormal para o espaço de Hilbert analisado, temos a relação de completude

$$\sum_{k,\ell,\pm\phi} |\psi_{k\ell}^{\pm\phi}\rangle \langle \psi_{k\ell}^{\pm\phi}| = I \quad (4.45)$$

e essa relação podemos relacionar os autovetores de  $-U$  e  $\mathcal{U}_0$  como

$$\langle 0, 0, 0 | \lambda \rangle = \sum_{k,\ell,\pm\phi} \langle 0, 0, 0 | \psi_{k\ell}^{\pm\phi} \rangle \langle \psi_{k\ell}^{\pm\phi} | \lambda \rangle, \quad (4.46)$$

onde o somatório em ambas equações corre sobre  $(k, \ell)$  para todo  $\pm\phi$ . Esse produto interno é a amplitude do vetor  $|0, 0, 0\rangle$  neste autovetor  $|\lambda\rangle$  e que será usado posteriormente.

Por outro lado, temos pela equação 4.37 que  $\langle \psi_{k\ell}^{\pm\phi} | \mathcal{U}_0 | \lambda \rangle = \langle \psi_{k\ell}^{\pm\phi} | U R_0 | \lambda \rangle$  e podemos obter através da equação 4.38 a igualdade

$$\langle \psi_{k\ell}^{\pm\phi} | \lambda \rangle = \frac{2 \langle 0, 0, 0 | \lambda \rangle \langle \psi_{k\ell}^{\pm\phi} | 0, 0, 0 \rangle}{1 - e^{i(\pi + \lambda \pm \phi_{k\ell})}}. \quad (4.47)$$

Para reescrever a equação 4.46 utilizaremos a equação anterior e, para a primeira parcela da multiplicação, pela equação 4.26, temos que

$$\langle 0, 0, 0 | \psi_{k\ell}^{\pm\phi} \rangle = \langle 0 | v_{k\ell}^{\pm\phi} \rangle \frac{1}{n}. \quad (4.48)$$

e, portanto, temos

$$\langle 0, 0, 0 | \lambda \rangle = \sum_{k,\ell,\pm\phi} \frac{|\langle 0 | v_{k\ell}^{\pm\phi} \rangle|^2}{1 - e^{i(\pi + \lambda \pm \phi_{k\ell})}} = \frac{n^2}{2}, \quad (4.49)$$

que é válida se  $\lambda \pm \phi_{k\ell}$  não é um múltiplo ímpar de  $\pi$  para todo  $k, \ell$ . Podemos utilizar a identidade

$$\frac{2}{1 - e^{ix}} = 1 + i \frac{\text{sen } x}{1 - \cos x} \quad (4.50)$$

para mostrar que a parte imaginária da equação 4.48 é

$$\sum_{k,\ell,\pm\phi} |\langle 0 | v_{k\ell}^{\pm\phi} \rangle|^2 \frac{\text{sen}(\lambda \pm \phi_{k\ell})}{1 + \cos(\lambda \pm \phi_{k\ell})} = 0 \quad (4.51)$$

e que pode ser escrita, retirando os termos onde  $(k, \ell) = (0, 0)$ , como

$$\sum_{\substack{k,\ell=0 \\ (k,\ell) \neq (0,0)}}^{n-1} \frac{|\langle 0 | v_{k\ell}^{+\phi} \rangle|^2 \text{sen}(\lambda + \phi_{k\ell})}{1 + \cos(\lambda + \phi_{k\ell})} + \frac{|\langle 0 | v_{k\ell}^{-\phi} \rangle|^2 \text{sen}(\lambda - \phi_{k\ell})}{1 + \cos(\lambda - \phi_{k\ell})} = \cot \frac{\lambda}{2}. \quad (4.52)$$

A equação 4.52 pode ser usada para calcular  $\lambda$  numericamente escolhendo uma solução positiva o mais próximo de zero. Para fazer analiticamente, supomos que  $\lambda \ll \phi_{\min}$  para  $n \gg 1$ . Devemos checar a validade dessa proposição ainda. Expandindo essa equação até a ordem de  $\mathcal{O}(\lambda^2)$  nós obtemos

$$\lambda = \pm \frac{1}{nC}, \quad (4.53)$$

onde

$$C^2 = \frac{1}{n^2} \sum_{\substack{k,\ell=0 \\ (k,\ell) \neq (0,0)}}^{n-1} \frac{1}{2 + a_{k\ell}} + \mathcal{O}(1), \quad (4.54)$$

e

$$a_{k\ell} = \frac{3}{4} \left( \frac{1}{3} - \cos \frac{2\pi k}{n} - \cos \frac{2\pi \ell}{n} - \cos \frac{2\pi(k-\ell)}{n} \right), \quad (4.55)$$

onde  $\theta = \pi/3$ . A equação 4.53 mostra que ambos  $e^{\pm i\lambda}$  são autovalores de  $\mathcal{U}_0$ . No apêndice D mostramos que  $C = \Theta(\sqrt{\ln n})$ . Portanto,  $1/\lambda = \Theta(\sqrt{N \ln N})$ . Sendo  $\phi_{\min} = \Theta(1/\sqrt{N})$ , isto confirma que  $\lambda \ll \phi_{\min}$  para  $n \gg 1$  é uma aproximação válida.

Usando (4.47) na condição de normalização

$$\sum_{k\ell} |\langle \psi_{k\ell}^\phi | \lambda \rangle|^2 = 1 \quad (4.56)$$

e tendo

$$|\langle \psi_{k\ell}^\phi | 000 \rangle|^2 = |\langle 0 | v_{k\ell}^\phi \rangle|^2 \frac{1}{n^2} \quad (4.57)$$

$$\frac{1}{|\langle 000 | \lambda \rangle|^2} = \frac{2}{n^2} \sum_{k,\ell} \frac{|\langle 000 | v_{k\ell}^\phi \rangle|^2}{1 + \cos(\lambda + \phi_{k\ell})} + \frac{|\langle 000 | v_{k\ell}^{-\phi} \rangle|^2}{1 + \cos(\lambda - \phi_{k\ell})}. \quad (4.58)$$

Separando os termos com  $(k, \ell) = (0, 0)$ , assumindo que  $\lambda \ll \phi_{\min}$  for  $n \gg 1$ , e mantendo os termos dominantes, nós obtemos

$$\frac{1}{|\langle 000 | \lambda \rangle|^2} = \frac{4}{n^2 \lambda^2} + \frac{4}{n^2} \sum_{\substack{k,\ell=0 \\ (k,\ell) \neq (0,0)}}^{n-1} \frac{1}{2 + a_{k\ell}} + \mathcal{O}(1). \quad (4.59)$$

Usando as equações (4.53) e (4.54), temos que

$$\frac{1}{|\langle 000 | \lambda \rangle|^2} = \frac{8}{n^2 \lambda^2} + \mathcal{O}(1). \quad (4.60)$$

Sem perda de generalidade, assumimos que  $\langle 0, 0, 0 | \lambda \rangle$  é um número real e positivo. De fato, se  $\langle 0, 0, 0 | \lambda \rangle = a e^{ib}$ , onde  $a$  e  $b$  são números reais e  $a$  é positivo, podemos redefinir  $|\lambda \rangle$  como  $e^{-ib} |\lambda \rangle$ . Após essa redefinição,  $\langle 0, 0, 0 | \lambda \rangle$  é um número real positivo dado por

$$\langle 0, 0, 0 | \lambda \rangle = \frac{n\lambda}{2\sqrt{2}} + \mathcal{O}(1). \quad (4.61)$$

Este mesmo raciocínio se aplica a  $\langle 0, 0, 0 | \lambda^- \rangle$ , e também obtemos

$$\langle 0, 0, 0 | \lambda^- \rangle = \frac{n\lambda}{2\sqrt{2}} + \mathcal{O}(1) \quad (4.62)$$

Decompondo  $|\psi_0 \rangle$  na base de autovetores  $\mathcal{U}_0$ , obtemos

$$|\psi_0 \rangle = \langle \lambda | \psi_0 \rangle |\lambda \rangle + \langle \lambda^- | \psi_0 \rangle |\lambda^- \rangle + |\psi_0^\perp \rangle, \quad (4.63)$$

onde  $|\psi_0^\perp \rangle$  é a componente de  $|\psi_0 \rangle$  que é ortogonal ao plano gerado por  $|\lambda \rangle$  e  $|\lambda^- \rangle$ , onde  $|\lambda^- \rangle$  é autovetor de  $\mathcal{U}_0$  associado a  $e^{-\lambda i}$ . Usando a equação (4.26) e  $|v_{00}^\phi \rangle = |+\rangle$ , verificamos que  $|\psi_0 \rangle = |\psi_{00}^\phi \rangle$ . Usando a equação (4.47) com  $(k, \ell) = (0, 0)$ , obtemos

$$\langle \lambda | \psi_0 \rangle = \frac{\lambda - 2i}{4} + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (4.64)$$

Usando a equação (4.47) com  $(k, \ell) = (0, 0)$  novamente, mas desta vez substituindo  $|\lambda \rangle$  por  $|\lambda^- \rangle$ , obtemos  $\langle \lambda^- | \psi_0 \rangle = (\langle \lambda | \psi_0 \rangle)^*$ . Verificamos, desta forma, que

$$|\langle \lambda | \psi_0 \rangle|^2 + |\langle \lambda^- | \psi_0 \rangle|^2 = \frac{1}{2} + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (4.65)$$

Então, podemos ignorar os termos  $|\psi_0^\perp\rangle$  na equação (4.63).

Podemos escrevemos, por fim, a evolução do operador de busca através da sua decomposição espectral, de posse das equações (4.63) e (4.64), no formato

$$\begin{aligned} (\mathcal{U}_0)^t |\psi_0\rangle &= \left( \frac{(\lambda - 2i) e^{i\lambda t}}{4} + \mathcal{O}(\lambda^2) \right) |\lambda\rangle + \\ &\quad \left( \frac{(\lambda + 2i) e^{-i\lambda t}}{4} + \mathcal{O}(\lambda^2) \right) |\lambda^-\rangle. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Usando (4.60), temos

$$|\langle 000 | (\mathcal{U}_0)^t | \psi_0 \rangle|^2 = \frac{n^2 \lambda^2}{8} \sin^2(\lambda t) + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (4.67)$$

O tempo de execução é o primeiro valor de  $t$  que maximiza o lado direito da equação (4.67), que é

$$t = \frac{\pi}{2\lambda}, \quad (4.68)$$

ignorando termos  $\mathcal{O}(\lambda^2)$ . A probabilidade de sucesso é

$$P = \frac{n^2 \lambda^2}{8} + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (4.69)$$

Sendo  $1/\lambda = \Theta(\sqrt{N \ell n N})$ , o tempo de execução será

$$t = \Theta(\sqrt{N \ell n N}) \quad (4.70)$$

e a probabilidade de sucesso será

$$P = \Theta\left(\frac{1}{\ell n N}\right). \quad (4.71)$$

No artigo de [Tulsi \(2008\)](#) podemos ver uma modificação no algoritmo de busca bidimensional e que pode ser usado para aumentar a probabilidade sem aumentar o número de passos. Empregando essa modificação, a probabilidade fica na ordem de  $\mathcal{O}(1)$  e a complexidade de busca como  $\mathcal{O}(\sqrt{N \ell n N})$

## 5 Discussão, Conclusão e Perspectivas

Na introdução fizemos um trabalho de estado da arte na pesquisa em caminhadas quânticas, ainda que alguns trabalhos tenham ficado de fora. Não foi um trabalho exaustivo, mas elencamos os principais trabalhos e extrema relevância para esta tese. Tivemos o cuidado de construir desde o início da computação quântica chegando nos trabalhos de caminhadas quânticas escalonadas.

O segundo capítulo da tese teve por meta construir o modelo de caminhada empregado na tese e que ilustramos pelos problemas da reta e da grade bidimensional. Em especial sobre este último temos alguns problemas em aberto: encontrar a decomposição espectral para um ângulo genérico nos hamiltonianos, calcular o desvio padrão neste modelo de caminhadas e também analisar o fenômeno de localização. Um avanço que tivemos aqui foi de fazer uma simulação que indica, de fato, que o melhor ângulo para o desvio padrão é o  $\theta = \pi/4$  – assim como proposto no trabalho de [Fernandes e Portugal \(2016\)](#).

No terceiro capítulo temos a análise da grade de cliques. Conseguimos a decomposição espectral, embora não utilizando os hamiltonianos, e um gráfico apontando que a melhor escolha para o ângulo será  $\theta = \pi/2$  – sendo este equivalente ao modelo desconsiderando os hamiltonianos. O trabalho de [Santos \(2018\)](#) mostra que essa a interseção de polígonos das tesselações gera autovalores  $\pm 1$  no espectro do operador, o que abre para análise do fenômeno de localização neste grafo.

O quarto capítulo, onde temos as maiores contribuições na tese, é uma extensa análise da grade hexagonal no modelo de caminhada escalonada. A primeira contribuição desta tese são as simulações desta caminhada e que dão a assinatura do passeio no gráfico e que são bem distintas de outros modelos. A segunda contribuição foi a decomposição espectral para o operador considerando um ângulo genérico no hamiltonianos, sendo não antes feito para outros grafos. Através dessa decomposição conseguimos, de forma analítica, estudar o fenômeno de localização e observando sua inexistência para um ângulo genérico. Fizemos também simulações que indicam uma correlação entre o desvio padrão e o problema de busca. A terceira grande contribuição da tese foi a análise, também para um ângulo genérico nos hamiltonianos, desta caminhada no problema de busca: encontramos que o ângulo  $\theta = \pi/3$  tem o menor argumento positivo, sendo parte essencial no problema de busca e temos que a complexidade é da ordem de  $\mathcal{O}(\sqrt{N \ell n N})$  – sendo a melhor complexidade conhecida em problemas de busca até hoje. Todos esses resultados do capítulo foram publicados em nosso trabalho de [Chagas et al. \(2018\)](#).

Temos muitas perguntas em aberto, algumas que já colocamos ao longo do texto e na conclusão, mas que iremos sumarizar e conjecturar possíveis respostas:

1. Existem apenas três grades bidimensionais regulares: triangular, quadrada e hexagonal. Resta descobrir a decomposição espectral e saber como a caminhada quântica escalonada se comporta em grade triangular;
2. O desvio padrão pode ser estudado com maior detalhe para essas três grades e descobrir  $\theta$  nos hamiltonianos com maior espalhamento;
3. O fenômeno de localização fica em aberto para as grades quadrada, triangular e grade de cliques;
4. Podemos analisar o problema de busca para a grade triangular e aprimorar para a grade quadrada com  $\theta$  mais geral;
5. Uma questão emerge quando o valor de  $\theta$  que produz o maior espalhamento também é o que dá a busca mais rápida;
6. Conjecturamos que o número de tesselações  $k$  está relacionado com a escolha do ângulo nos hamiltonianos onde  $\theta = \pi/k$ ;
7. Essa conjectura será melhor analisada na grade triangular pois ela admite, no mínimo, duas tesselações com  $k = 3$  e  $k = 6$ ;
8. Devemos ainda analisar a localização do operador modificado no problema de busca e verificar se o fenômeno persiste ou não;

## Referências

- ABAL, G. et al. Spatial search on a honeycomb network. *Mathematical Structures in Computer Science*, v. 20, p. 999–1009, 2010. Citado na página 23.
- ABREU, A. et al. The graph tessellation cover number: extremal bounds, efficient algorithms and hardness. 2017. Citado na página 25.
- ABREU, A. et al. The tessellation problem of quantum walks. 2017. Citado na página 25.
- AHARONOV, D. et al. Quantum walks on graphs. *STOC '01 Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing*, p. 50–59, 2001. Citado na página 21.
- AHARONOV, D. et al. Adiabatic quantum computation is equivalent to standard quantum computation. *SIAM Journal on Computing*, v. 37, n. 1, 2007. Citado na página 22.
- AHARONOV, Y.; DAVIDOVICH, L.; ZAGURY, N. Quantum random walks. *Physical Review A*, v. 48, n. 2, p. 1687–1690, 1993. Citado na página 21.
- AMBAINIS, A. Quantum walk algorithm for element distinctness. *SIAM Journal on Computing*, v. 37, n. 1, p. 210–239, 2007. Citado na página 21.
- AMBAINIS, A. et al. One-dimensional quantum walks. *STOC '01 Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing*, p. 37–49, 2001. Citado na página 21.
- AMBAINIS, A.; KEMPE, J.; RIVOSH, A. Coins make quantum walks faster. *SODA '05 Proceedings of the sixteenth annual ACM-SIAM symposium on Discrete algorithms*, p. 1099–1108, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 30, 56 e 83.
- AMBAINIS, A.; PORTUGAL, R.; NAHIMOV, N. Spatial search on grids with minimum memory. *Quantum Information and Computation*, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 56.
- BACHTOLD, A. et al. Logic circuits with carbon nanotube transistors. *Science*, v. 294, n. 5545, p. 1317–1320, 2001. Citado na página 23.
- BALL, P. *Natures's Patterns: A Tapestry in Three Parts*. [S.l.]: Oxford University Press, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 47.
- BANULS, M. C. et al. Quantum walk with a time-dependent coin. *Physical Review A*, v. 73, n. 062304, 2006. Citado na página 53.
- BARITOMPA, W. P.; BULGER, D. W.; WOOD, G. R. Grover's quantum algorithm applied to global optimization. *SIAM Journal on Optimization*, v. 15, n. 4, p. 1170–1184, 2005. Citado na página 21.
- BENIOFF, P. The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical hamiltonian model of computers as represented by turing machines. *Journal of Statistical Physics*, v. 22, n. 5, p. 563–591, 1980. Citado na página 19.

- BENNETT, C. H. Logical reversibility of computation. *IBM Journal of Research and Development*, v. 17, n. 6, p. 525–532, 1973. Citado na página 19.
- BENNETT, C. H.; BRASSARD, G. Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing. *Proceedings of IEEE International Conference on Computers, Systems and Signal Processing, Bangalore, 10-12 December*, p. 175–179, 1984. Citado na página 19.
- BERNSTEIN, D. J.; BUCHMANN, J.; DAHMEN, E. *Post-Quantum Cryptography*. [S.l.]: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009. Citado na página 20.
- BERTHIAUME, A.; BRASSARD, G. The quantum challenge to structural complexity theory. *Proceedings of the Seventh Annual Structure in Complexity Theory Conference*, 1992. Citado na página 20.
- BOHM, J. et al. Microwave experiments on quantum search and directed transport in artificial graphene. *Physical Review Letters*, v. 114, n. 11, p. 110501, 2015. Citado na página 23.
- BOUGROURA, H. et al. Quantum walk transport properties on graphene structures. *Physical Review A*, v. 94, p. 062331, 2016. Citado na página 23.
- BRASSARD, G. et al. Quantum amplitude amplification and estimation. *Contemporary Mathematics*, v. 305, p. 53–74, 2002. Citado na página 20.
- CHAGAS, B. et al. Staggered quantum walk on hexagonal lattices. *Physical Review A*, v. 98, n. 5, p. 052310, 2018. Citado 3 vezes nas páginas 24, 48 e 61.
- CHAKRABORTY, S. et al. Spatial search by quantum walk is optimal for almost all graphs. *Physical Review Letters*, v. 116, n. 10, p. 100501, 2016. Citado na página 22.
- CHILDS, A. M. Universal computation by quantum walk. *Physical Review Letters*, v. 102, n. 18, p. 180501, 2009. Citado na página 22.
- CHILDS, A. M.; GOLDSTONE, J. Spatial search by quantum walk. *Physical Review A*, v. 70, n. 2, p. 022314, 2004. Citado na página 22.
- CLEGG, K. D. et al. Travelling salesman problem solved ‘in materio’ by evolved carbon nanotube device. *International Conference on Parallel Problem Solving from Nature – PPSN XIII. PPSN 2014. Lecture Notes in Computer Science*, v. 8672, p. 692–701, 2014. Citado na página 23.
- COPPERSMITH, D. An approximate fourier transform useful in quantum factoring. *IBM Research Report*, v. 19642, 1994. Citado na página 20.
- COUTINHO, G.; PORTUGAL, R. Discretization of continuous-time quantum walks via the staggered model with hamiltonians. *Natural Computing*, p. 1–7, 2018. Citado na página 23.
- DAM, W. van; MOSCA, M.; VAZIRANI, U. How powerful is adiabatic quantum computation? *Proceedings 2001 IEEE International Conference on Cluster Computing*, p. 279–287, 2001. Citado na página 22.
- DEUTSCH, D. Quantum theory, the church-turing principle and the universal quantum computer. *Proceedings of The Royal Society A Mathematical Physical and Engineering Sciences*, v. 400, n. 1818, 1985. Citado na página 19.

- DEUTSCH, D. Quantum computational networks. *Proceedings of The Royal Society A Mathematical Physical and Engineering Sciences*, v. 425, n. 1868, 1989. Citado na página 20.
- DEUTSCH, D.; JOZSA, R. Rapid solution of problems by quantum computation. *Proceedings of The Royal Society A Mathematical Physical and Engineering Sciences*, v. 439, n. 1907, 1992. Citado na página 20.
- DIVINCENZO, D. P. Two-bit gates are universal for quantum computation. *Physical Review A*, v. 51, n. 1015, 1994. Citado na página 19.
- DYER, M.; FRIEZE, A.; KANNAN, R. A random polynomial-time algorithm for approximating the volume of convex bodies. *Journal of the ACM*, v. 38, n. 1, p. 1–17, 1991. Citado na página 21.
- DÜRRE, C.; HØYER, P. A quantum algorithm for finding the minimum. 1996. Citado na página 21.
- FALK, M. D. Quantum search on the spatial grid. 2013. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 25.
- FARHI, E. et al. Quantum computation by adiabatic evolution. 2000. Citado na página 21.
- FARHI, E.; GUTMANN, S. Quantum mechanical square root speedup in a structured search problem. 1997. Citado na página 20.
- FARHI, E.; GUTMANN, S. An analog analogue of a digital quantum computation. *Physical Review A*, v. 57, n. 4, p. 2403–2406, 1998. Citado na página 21.
- FERNANDES, T. D.; PORTUGAL, R. Quantum search on two-dimensional lattice with the staggered model. *PACIS. 4th Conference of Computational Interdisciplinary Science*, 2016. Citado 4 vezes nas páginas 30, 32, 33 e 61.
- FEYNMAN, R. P. There's plenty of room at the bottom. *Feynman and computation*, p. 63–76, 1959. Citado na página 18.
- FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics*, v. 21, n. 6-7, p. 467–488, 1982. Citado na página 19.
- FOULGER, I.; GNUTZMANN, S.; TANNER, G. Quantum walks and quantum search on graphene lattices. *Physical Review A*, v. 91, p. 062323, 2015. Citado na página 23.
- FRANCO, C. D.; PATERNOSTRO, M. Localizationlike effect in two-dimensional alternate quantum walks with periodic coin operations. *Physical Review A*, v. 91, n. 1, p. 012328, 2015. Citado na página 23.
- GRIMMETT, G.; JANSON, S.; SCUDO, P. F. Weak limits for quantum random walks. *Physical Review E*, v. 69, n. 2, p. 026119, 2003. Citado na página 21.
- GROVER, L. K. A fast quantum mechanical algorithm for database search. *STOC '96 Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, p. 212–219, 1996. Citado na página 20.

- GROVER, L. K. Quantum search on structured problems. *Chaos, Solitons and Fractals*, v. 10, n. 10, p. 1695–1705, 1999. Citado na página 20.
- HAMADA, N.; OSHIYAMA, S. ichi S. A. New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules. *Physical Review Letters*, v. 68, n. 1579, 1992. Citado na página 23.
- HOLEVO, A. S. Bounds for the quantity of information transmitted by a quantum communication channel. *Probl. Peredachi Inf.*, v. 9, n. 3, p. 3–11, 1973. Citado na página 19.
- INGARDEN, R. S. Quantum information theory. *Reports on Mathematical Physics*, v. 10, p. 43–72, 1976. Citado na página 19.
- INUI, N.; KONISHI, Y.; KONNO, N. Localization of two-dimensional quantum walks. *Physical Review A*, v. 69, n. 5, p. 052323, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 53.
- INUI, N.; KONNO, N.; SEGAWA, E. One-dimensional three-state quantum walk. *Physical Review E*, v. 72, n. 5, p. 056112, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 53.
- JAFARIZADEH, M. A.; SUFIANI, R. Investigation of continuous-time quantum walk on root lattice  $a_n$  and honeycomb lattice. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 381, n. 15, p. 116–142, 2007. Citado na página 23.
- JERRUM, M.; SINCLAIR, A.; VIGODA, E. A polynomial-time approximation algorithm for permanent of a matrix with nonnegative entries. *Journal of the ACM*, v. 51, n. 4, p. 671–697, 2004. Citado na página 21.
- KARAFYLLIDIS, I. G. Quantum walks on graphene nanoribbons using quantum gates as coins. *Journal of Computational Science*, v. 11, p. 326–330, 2015. Citado na página 23.
- KOLLÁR, B.; KISS, T.; JEX, I. Strongly trapped two-dimensional quantum walks. *Physical Review A*, v. 91, n. 2, p. 022308, 2015. Citado na página 23.
- KONNO, N. A new type of limit theorems for the one-dimensional quantum random walk. *J. Math. Soc. Japan*, v. 57, n. 4, p. 1179–1195, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 53.
- KROVI, H. et al. Finding is as easy as detecting for quantum walks. *Automata, Languages and Programming. ICALP*, v. 6198, 2010. Citado na página 22.
- LARA, P. C. S.; PORTUGAL, R.; LAVOR, C. A new hybrid classical-quantum algorithm for continuous global optimization problems. *Journal of Global Optimization*, v. 60, n. 2, p. 317–331, 2014. Citado na página 21.
- LOVETT, N. B. et al. Universal quantum computation using the discrete quantum walk. *Physical Review A*, v. 81, n. 4, p. 042330, 2010. Citado na página 21.
- LYU, C.; YU, L.; WU, S. Localization in quantum walks on a honeycomb network. *Physical Review A*, v. 92, n. 5, p. 052305, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 53.
- MACKAY, T. D. et al. Quantum walks in higher dimensions. *JOURNAL OF PHYSICS A: MATHEMATICAL AND GENERAL*, v. 35, p. 2745–2753, 2002. Citado na página 53.
- MAGNIEZ, F. et al. Search via quantum walk. *SIAM Journal on Computing*, v. 40, n. 1, p. 142–164, 2006. Citado na página 22.

- MAGNIEZ, F.; SANTHA, M.; SZEGEDY, M. Quantum algorithms for the triangle problem. *SIAM Journal on Computing*, v. 37, n. 2, p. 413–424, 2007. Citado na página [22](#).
- MANIN, Y. I. Computável e incomputável (em russo). *Moscow, Sovetskoye Radio*, 1980. Citado na página [19](#).
- MINTMIRE, J. W.; DUNLAP, B. I.; WHITE, C. T. Are fullerene tubules metallic? *Physical Review Letters*, v. 68, n. 631, 1992. Citado 4 vezes nas páginas [12](#), [23](#), [47](#) e [48](#).
- MOORE, G. E. Cramming more components onto integrated circuits. *Electronics*, v. 38, n. 8, p. 114–117, 1965. Citado na página [19](#).
- MOQADAM, J. K.; OLIVEIRA, M. C. de; PORTUGAL, R. Staggered quantum walks with superconducting microwave resonators. *Physical Review B*, v. 95, n. 14, p. 144506, 2017. Citado na página [23](#).
- MOTWANI, R.; RAGHAVAN, P. *Randomized Algorithms*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1995. Citado na página [21](#).
- NAYAK, A.; VISHWANATH, A. Quantum walk on the line. 2000. Citado na página [21](#).
- NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. [S.l.]: Cambridge University Press New York, NY, USA, 2011. Citado na página [71](#).
- PAKDEL, A. et al. Low-dimensional boron nitride nanomaterials. *Materials Today*, v. 15, n. 6, p. 256–265, 2012. Citado na página [47](#).
- PAPADIMITRIOUS, C. *Computational Complexity*. [S.l.]: Pearson, 1994. Citado na página [21](#).
- PATEL, A.; RAGHUNATHAN, K.; RAHAMAN, M. A. Search on a hypercubic lattice through a quantum random walk: II.  $d=2$ . *Physical Review A*, v. 82, n. 3, p. 032331, 2010. Citado na página [22](#).
- PATEL, A.; RAGHUNATHAN, K.; RUNGTA, P. Quantum random walks do not need a coin toss. *Physical Review A*, v. 71, n. 3, p. 032347, 2005. Citado 2 vezes nas páginas [22](#) e [30](#).
- PATEL, A.; RAHAMAN, M. A. Search on a hypercubic lattice using a quantum random walk: I.  $d > 2$ . *Physical Review A*, v. 82, n. 3, p. 032330, 2010. Citado na página [22](#).
- PEMANTLE, R.; WILSON, M. C. Asymptotic expansions of oscillatory integrals with complex phase. *Algorithmic Probability and Combinatorics of Contemporary Mathematics*, v. 520, p. 221–240, 2010. Citado na página [54](#).
- POPLAVSKII, R. P. Thermodynamical models of information processing. *Soviet Physics Uspekhi*, v. 18, n. 3, 1975. Citado na página [19](#).
- PORTUGAL, R. Establishing the equivalence between szegedy’s and coined quantum walks using the staggered model. *Quantum Information Processing*, v. 15, n. 4, p. 1387–1409, 2015. Citado na página [22](#).

- PORTUGAL, R. Staggered quantum walks on graphs. *Physical Review A*, v. 93, n. 6, p. 062335, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 35.
- PORTUGAL, R. *Quantum Walks and Search Algorithms*. [S.l.]: Springer, 2018. Citado 4 vezes nas páginas 25, 29, 45 e 56.
- PORTUGAL, R.; BOETTCHER, S.; FALKNER, S. One-dimensional coinless quantum walks. *Physical Review A*, v. 91, n. 5, p. 052319, 2015. Citado na página 22.
- PORTUGAL, R.; FERNANDES, T. D. Quantum search on the two-dimensional lattice using the staggered model with hamiltonians. *Physical Review A*, v. 95, n. 4, p. 042341, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 23, 25 e 30.
- PORTUGAL, R.; OLIVEIRA, M. C. de; MOQADAM, J. K. Staggered quantum walks with hamiltonians. *Physical Review A*, v. 95, n. 1, p. 012328, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 22, 26 e 34.
- PORTUGAL, R. et al. The staggered quantum walk model. *Quantum Information Processing*, v. 15, n. 1, p. 85–101, 2016. Citado 3 vezes nas páginas 22, 25 e 34.
- SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing, Co, 1994. Citado na página 71.
- SANTHA, M. Quantum walk based search algorithms. *International Conference on Theory and Applications of Models of Computation. TAMC 2008. Lecture Notes in Computer Science*, v. 4978, p. 31–46, 2008. Citado na página 22.
- SANTOS, R. A. M. The role of tessellation intersection in staggered quantum walks. 2018. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 61.
- SANTOS, R. A. M.; PORTUGAL, R.; BOETTCHER, S. Moments of coinless quantum walks on lattices. *Quantum Information Processing*, v. 14, n. 9, p. 3179–3191, 2015. Citado na página 33.
- SCHÖNING, U. A probabilistic algorithm for k-sat and constraint satisfaction problems. *40th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, p. 410–, 1999. Citado na página 21.
- SEGAWA, E. Localization of quantum walks induced by recurrence properties of random walks. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience: Special Issue: Theoretical and Mathematical Aspects of the Discrete Time Quantum Walk*, v. 10, p. 1583–1590, 2013. Citado na página 23.
- SHENVI, N.; KEMPE, J.; WHALEY, B. A quantum random walk search algorithm. *Physical Review A*, v. 67, n. 5, p. 052307, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 56.
- SHOR, P. W. Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring. *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, p. 124–134, 1994. Citado na página 20.
- SIMON, D. R. On the power of quantum computation. *SIAM Journal on Computing*, v. 26, n. 5, p. 1474–1483, 1997. Citado na página 20.

- STEFAN, M.; JEX, I.; KISS, T. Recurrence and pólya number of quantum walks. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 020501, 2008. Citado na página 23.
- SZEGEDY, M. Quantum speed-up of markov chain based algorithms. *45th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*, 2004. Citado na página 22.
- TANS, S. J.; VERSCHUEREN, A. R. M.; DEKKER, C. Room-temperature transistor based on a single carbon nanotube. *Nature*, v. 393, p. 49–52, 1998. Citado na página 23.
- TOFFOLI, T. Reversible computing. *Proceedings of the 7th Colloquium on Automata, Languages and Programming*, 1980. Citado na página 19.
- TREGENNA, B. et al. Controlling discrete quantum walks: Coins and initial states. *New Journal of Physics*, v. 5, n. 1, 2003. Citado na página 53.
- TULSI, A. Faster quantum walk algorithm for the two dimensional spatial search. *Physical Review A*, v. 78, n. 1, p. 012310, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 60.
- TURING, A. On computable numbers, with an application to the entscheidungsproblem. *Proceedings of the London Mathematical Society*, s2-42, n. 1, p. 230–265, 1936. Citado na página 19.
- VENÂNCIO, B. F.; ANDRADE, F. M.; LUZ, M. G. E. da. Unveiling and exemplifying the unitary equivalence of discrete time quantum walk models. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 46, 2013. Citado na página 23.
- WALPOLE, R. E. et al. *Probability and Statistics for Engineers and Scientists*. [S.l.]: Pearson India; 9th edition, 2013. Citado na página 29.
- WHITE, C. T.; TODOROV, T. N. Carbon nanotubes as ballistic conductors. *Nature*, v. 393, n. 240-242, 1998. Citado na página 23.
- WIESNER, S. Conjugate coding. *ACM SIGACT News - A special issue on cryptography*, v. 15, n. 1, p. 78–88, 1960. Citado na página 19.
- ZALKA, C. Grover’s quantum searching algorithm is optimal. *Physical Review A*, v. 60, n. 4, p. 2746–2751, 1999. Citado na página 20.

# Apêndices

# APÊNDICE A – Computação Quântica

A notação que utilizamos ao longo do texto segue a formalização de Dirac. Revisaremos alguns fatos importantes desta notação e uma referência para um estudo mais detalhado é a de [Sakurai \(1994\)](#). Já em termos mais técnicos da computação quântica sugerimos a referência de [Nielsen e Chuang \(2011\)](#). Organizamos este apêndice introduzindo os postulados da mecânica quântica, explicando a notação de Dirac e exemplificando na computação quântica.

**Postulado 1** (Espaço de Estados). *Para todo sistema físico isolado podemos associar um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ , chamado de espaço de estados do sistema. O sistema físico é totalmente descrito por seu vetor de estado, um vetor unitário  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ . A dimensão de  $\mathcal{H}$  é definida pelo grau de liberdade do sistema físico em questão.*

O primeiro postulado nos fornece o espaço e as regras do jogo, sendo  $|\cdot\rangle$  a notação de Dirac para um vetor chamado de *ket*. O espaço é de Hilbert, então já temos noções de produto interno, e assim a de norma, naturalmente. E como este espaço é vetorial, a combinação linear de elementos neste espaço também pertencerá a ele. Assim, sendo  $\alpha_i \in \mathbb{C}$  e  $|\varphi_i\rangle$  vetores de base do espaço, temos que

$$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \quad (\text{A.1})$$

será dita uma **superposição**, que é um fenômeno quântico bastante explorado nos algoritmos, pois os estados (vetores) de base coexistem.

Na computação clássica temos a *bit* como unidade mínima de informação, assumindo um dos escalares no conjunto  $\{0, 1\}$ , um espaço de escalares. Nosso espaço em computação quântica é vetorial, então definimos vetores unitários e de dimensão 2 como unidades mínimas e que chamamos de **qubit**:

$$|\psi\rangle = \alpha |\psi_0\rangle + \beta |\psi_1\rangle \quad (\text{A.2})$$

, sendo  $\{|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle\}$  a base deste espaço,  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$  amplitudes e, pela unitariedade,  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Se considerarmos a base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  daremos o nome de **base computacional**. Assim, a base computacional para um qubit é

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

e um qubit nesta base será

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle. \quad (\text{A.4})$$

**Postulado 2** (Evolução). *A evolução temporal do estado de um sistema físico quântico fechado é descrita por um operador unitário. Isto é, para qualquer evolução do sistema fechado existe um operador  $U$  tal que, se o estado inicial do sistema é  $|\psi_0\rangle$ , então após a evolução o estado do sistema será  $|\psi_f\rangle = U|\psi_0\rangle$ .*

O primeiro postulado descreveu os objetos que manipulamos e o espaço onde eles estão inseridos. O segundo postulado dá a dinâmica deles, a forma como eles são manipulados e transformados. Portanto, a evolução de um estado  $|\psi\rangle$  será descrita por um operador  $U$ . E este operador deve ser unitário, ou seja, se, e somente se,  $UU^\dagger = U^\dagger U = I$ .

Este operador  $U$  caracterizará o circuito quântica que fará o sistema evoluir. Considerando  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}^2$ , então  $U \in \mathcal{H}^{2 \times 2}$ . Por exemplo, temos as matrizes de Pauli

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

**Postulado 3** (Composição de Sistemas). *Quando dois sistemas físicos são tratados como um sistema combinado, o espaço de estados do sistema físico combinado é o espaço produto de Kronecker  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  dos espaços de estados  $\mathcal{H}_1$  e  $\mathcal{H}_2$ , os subsistemas componentes. Se o primeiro sistema está no estado  $|\psi_1\rangle$  e o segundo no  $|\psi_2\rangle$ , então o estado do sistema combinado será  $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ .*

Os dois primeiros postulados referem-se a sistemas isolados e para uma única partícula. Se quisermos dizer algo sobre um sistema onde diversas podem interagir, necessitamos do terceiro postulado e que nos dá informações de um sistema composto.

Supomos a existência de  $n$  estados  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$ , e que pertencem aos espaços  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \dots, \mathcal{H}_n$ , respectivamente. O sistema composto e o estado a ele pertencente serão

$$\mathcal{H}_C = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n \quad (\text{A.6})$$

$$|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle \quad (\text{A.7})$$

onde  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_C$ .

Usamos uma notação mais compacta para dizer que uma matriz de Pauli atua em um sistema específico. Por exemplo, temos  $n$  sistemas em composição e cada um deles de um qubit; digamos que a matrix  $X$  atue apenas no primeiro qubit, então temos o operador

$$X_1 = \underbrace{X \otimes I \otimes \dots \otimes I}_{n \text{ termos}}. \quad (\text{A.8})$$

. A matriz identidade  $I$  deixa o sistema inalterado. E se ela atuar no  $j$ -ésimo sistema escrevemos  $X_j$ . E isso pode ser estendido para as outras matrizes:  $Z_j$  e  $Y_j$ .

**Postulado 4** (Medição). *As medições quânticas são descritas por operadores  $\{M_m\}$  e que atuam sobre o espaço de estados do sistema satisfazendo a relação de completude,  $\sum_m M_m^\dagger M_m$ . O índice  $m$  se refere aos possíveis resultados da medição. Se o estado de um sistema quântico, imediatamente antes da medição, for  $|\psi\rangle$ , então a probabilidade do resultado  $m$  ocorrer é.*

$$p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle \quad (\text{A.9})$$

e o estado do sistema após a medição será

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{p(m)}} M_m | \psi \rangle \quad (\text{A.10})$$

Os três primeiros postulados consideram toda a informação quântica em um sistema fechado, sem influência externa. Necessitamos de um quarto postulado que nos diga o que acontece quando o sistema interage com o meio externo, quer seja por um experimentalista ao extrair alguma informação fazendo uma medição, ou alguma influência que deixe o sistema não mais fechado.

Um exemplo simples de medição é a medição de um qubit na base computacional. Esta medição em um qubit possui dois resultados definidos pelos operadores de medição

$$M_0 = |0\rangle \langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{e} \quad M_1 = |1\rangle \langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

onde  $\langle \cdot |$  é chamado de *bra*, sendo o conjugado transposto do *ket*. Chamamos  $|\cdot\rangle \langle \cdot|$  de produto externo e que resulta uma matriz, sendo o produto matricial de um vetor coluna por um linha. Supomos que o estado a ser medido é  $|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ . Portanto, a probabilidade do resultado da medição ser 0 será

$$p(0) = \langle \psi | M_0^\dagger M_0 | \psi \rangle = \langle \psi | M_0 | \psi \rangle = |\alpha|^2. \quad (\text{A.12})$$

Da mesma forma, a probabilidade da medição resultar 1 será  $p(1) = |\beta|^2$ . E o estado após a medição será um dos dois casos:

$$\frac{M_0 |\psi\rangle}{|\alpha|} = \frac{\alpha}{|\alpha|} |0\rangle, \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{M_1 |\psi\rangle}{|\beta|} = \frac{\beta}{|\beta|} |1\rangle. \quad (\text{A.14})$$

# APÊNDICE B – Análise de Fourier em Grade de Cliques

Esta apêndice possui os cálculos onde reduzimos o operador da grade de cliques da CQE de duas formas: a primeira utilizando oito vetores de base, a segunda utilizando apenas quatro vetores. Estes resultados são utilizados no capítulo 3 como forma de análise e interpretação da dinâmica desse sistema.

## B.1 Matrizes reduzidas $\tilde{U}_0$ e $\tilde{U}_1$ dimensão $8 \times 8$

A análise de Fourier que faremos tem por base as simetrias que cada grafo apresenta, considerando a tesselação empregada. O grafo de cliques possui, em primeira análise, uma simetria variando  $x, y$  e ficando um valor de  $p$ . Em outras palavras, qualquer clique  $K_8$  pode ser transladada trocando o de  $x$  e  $y$ . Dessa forma, escolheremos oito vetores de base para nossa análise de Fourier, e que seguem a expressão

$$|\psi_{k\ell}^p\rangle = \frac{1}{n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle |p\rangle \quad (\text{B.1})$$

sendo  $\omega = e^{2\pi i/n}$ ,  $p = 0, 1, \dots, 7$  e  $0 \leq k, \ell \leq n - 1$ .

Devemos agora encontrar uma matriz reduzida de tamanho  $8 \times 8$  pela dimensão da nova base escolhida. O operador deste problema é dado por  $U = U_1 U_0$ . Primeiramente, queremos descobrir a matriz reduzida  $\tilde{U}_0$  e depois  $\tilde{U}_1$  para comporem  $\tilde{U} = \tilde{U}_1 \tilde{U}_0$ . Temos que o operador de evolução  $U_0$  é dado por

$$U_0 = 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\alpha_{xy}\rangle \langle \alpha_{xy}| - I \quad (\text{B.2})$$

sendo

$$|\alpha_{xy}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{r=0}^7 |xy\rangle |r\rangle. \quad (\text{B.3})$$

Aplicamos  $U_0$  em cada vetor da nova base para conseguir uma combinação linear nesta nova base e assim construímos o espaço-coluna da matriz reduzida. Portanto, temos que a

expressão geral dessa aplicação é

$$U_0 |\psi_{k\ell}^p\rangle = \left( 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\alpha_{xy}\rangle \langle \alpha_{xy}| - I \right) \frac{1}{n} \sum_{x',y'=0}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} |x'y'\rangle |p\rangle \quad (\text{B.4})$$

$$= \frac{1}{4n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \sum_{x',y'=0}^{n-1} \sum_{r=0}^7 \sum_{r'=0}^7 \omega^{kx'+\ell y'} |xy\rangle |r\rangle \langle xy|x'y'\rangle \langle r'|p\rangle - |\psi_{k\ell}^p\rangle \quad (\text{B.5})$$

$$= \frac{1}{4n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \sum_{r=0}^7 \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle |r\rangle - |\psi_{k\ell}^p\rangle \quad (\text{B.6})$$

$$= \frac{1}{4n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \sum_{r \neq p} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle |r\rangle - \frac{3}{4} |\psi_{k\ell}^p\rangle \quad (\text{B.7})$$

$$= \frac{1}{4n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \sum_{r \neq p} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle |r\rangle - \frac{3}{4} |\psi_{k\ell}^p\rangle \quad (\text{B.8})$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{r \neq p} |\psi_{kl}^r\rangle - \frac{3}{4} |\psi_{k\ell}^p\rangle \quad (\text{B.9})$$

onde  $p = 0, 1, \dots, 7$ . Dessa forma, segue direto que a matriz reduzida para  $U_0$ , segundo essa nova base, segue a forma

$$\tilde{U}_0 = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -3 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -3 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -3 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -3 \end{bmatrix}$$

De forma análoga, o operador  $U_1$  utilizará as mesmas bases e faremos o mesmo tipo de cálculos e redução. Temos que o operador é descrito como

$$U_1 = 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\beta_{xy}^{(0)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(0)}| + |\beta_{xy}^{(1)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(1)}| - I \quad (\text{B.10})$$

sendo que os dois vetores de estado que o compõe são

$$|\beta_{xy}^{(0)}\rangle = \frac{1}{2} |xy\rangle (|0\rangle + |7\rangle) + \frac{1}{2} |x+1, y\rangle (|3\rangle + |4\rangle), \quad (\text{B.11})$$

$$|\beta_{xy}^{(1)}\rangle = \frac{1}{2} |xy\rangle (|1\rangle + |2\rangle) + \frac{1}{2} |x, y+1\rangle (|5\rangle + |6\rangle). \quad (\text{B.12})$$

Aplicaremos este operador em cada um dos vetores de base. Quando aplicado no primeiro vetor de base temos que

$$\begin{aligned}
 U_1 |\psi_{k\ell}^0\rangle &= \left( 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\beta_{xy}^{(0)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(0)}| + |\beta_{xy}^{(1)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(1)}| - I \right) \frac{1}{n} \sum_{x',y'=0}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} |xy\rangle |0\rangle \\
 &= \left( 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\beta_{xy}^{(0)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(0)}| - I \right) \frac{1}{n} \sum_{x',y'=0}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} |xy\rangle |0\rangle \\
 &= \frac{1}{2n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |\beta_{xy}^{(0)}\rangle - |\psi_{k\ell}^0\rangle \\
 &= \frac{1}{2n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle |0\rangle + |xy\rangle |7\rangle + |x+1, y\rangle |3\rangle + |x+1, y\rangle |4\rangle - |\psi_{k\ell}^0\rangle \\
 &= -\frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^0\rangle + \frac{1}{2} \omega^{-k} |\psi_{k\ell}^3\rangle + \frac{1}{2} \omega^{-k} |\psi_{k\ell}^4\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^7\rangle
 \end{aligned}$$

Analogamente, temos para  $p = 7$ , com os cálculos similares aos anteriores temos as igualdades

$$\begin{aligned}
 U_1 |\psi_{k\ell}^7\rangle &= \frac{1}{2n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle |0\rangle + |xy\rangle |7\rangle + |x+1, y\rangle |3\rangle + |x+1, y\rangle |4\rangle - |\psi_{k\ell}^0\rangle \\
 &= \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^0\rangle + \frac{1}{2} \omega^{-k} |\psi_{k\ell}^3\rangle + \frac{1}{2} \omega^{-k} |\psi_{k\ell}^4\rangle + -\frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^7\rangle
 \end{aligned}$$

Para  $p = 3, 4$  precisamos fazer uma mudança de variáveis já no primeiro produto interno. Porém, os cálculos são análogos também e temos

$$\begin{aligned}
 U_1 |\psi_{k\ell}^3\rangle &= \frac{1}{2n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |x-1, y\rangle |0\rangle + |x-1, y\rangle |7\rangle + |x, y\rangle |3\rangle + |x, y\rangle |4\rangle - |\psi_{k\ell}^3\rangle \\
 &= \frac{1}{2} \omega^k |\psi_{k\ell}^0\rangle - \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^3\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^4\rangle + \frac{1}{2} \omega^k |\psi_{k\ell}^7\rangle
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 U_1 |\psi_{k\ell}^4\rangle &= \frac{1}{2n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |x-1, y\rangle |0\rangle + |x-1, y\rangle |7\rangle + |x, y\rangle |3\rangle + |x, y\rangle |4\rangle - |\psi_{k\ell}^3\rangle \\
 &= \frac{1}{2} \omega^k |\psi_{k\ell}^0\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^3\rangle - \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^4\rangle + \frac{1}{2} \omega^k |\psi_{k\ell}^7\rangle
 \end{aligned}$$

Os demais vetores restantes –  $p = 1, 2, 5, 6$  – são feitos de forma semelhante aos casos anteriores, notando a substituição de variáveis adequadas. Assim sendo, temos que as expressões

$$\begin{aligned}
 U_1 |\psi_{k\ell}^1\rangle &= -\frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^1\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^2\rangle + \frac{1}{2} \omega^{-\ell} |\psi_{k\ell}^5\rangle + \frac{1}{2} \omega^{-\ell} |\psi_{k\ell}^6\rangle, \\
 U_1 |\psi_{k\ell}^2\rangle &= \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^1\rangle - \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^2\rangle + \frac{1}{2} \omega^{-\ell} |\psi_{k\ell}^5\rangle + \frac{1}{2} \omega^{-\ell} |\psi_{k\ell}^6\rangle, \\
 U_1 |\psi_{k\ell}^5\rangle &= \frac{1}{2} \omega^\ell |\psi_{k\ell}^1\rangle + \frac{1}{2} \omega^\ell |\psi_{k\ell}^2\rangle - \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^5\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^6\rangle, \\
 U_1 |\psi_{k\ell}^6\rangle &= \frac{1}{2} \omega^\ell |\psi_{k\ell}^1\rangle + \frac{1}{2} \omega^\ell |\psi_{k\ell}^2\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^5\rangle - \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^6\rangle.
 \end{aligned}$$

Por estes cálculos que fizemos, a matriz reduzida de  $U_1$  assume a forma

$$\tilde{U}_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & \omega^k & \omega^k & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & \omega^\ell & \omega^\ell & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & \omega^\ell & \omega^\ell & 0 \\ \omega^{-k} & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & \omega^{-k} \\ \omega^{-k} & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & \omega^{-k} \\ 0 & \omega^{-\ell} & \omega^{-\ell} & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & \omega^{-\ell} & \omega^{-\ell} & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \omega^k & \omega^k & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

e não é difícil verificar que elas são hermitianas e unitárias.

## B.2 Matrizes reduzidas $\tilde{U}_0$ e $\tilde{U}_1$ dimensão $4 \times 4$

Há uma segunda forma de fazer a análise para este grafo e que utiliza uma base de dimensão menor. A forma como podemos enxergar vem de que o operador reduzido  $8 \times 8$  possui certas equivalências em pares de vetores, como vamos mostrar a frente. Podemos ver também estes pares de vetores não possuem uma distinção nítida entre eles. Obviamente, esta intuição poderia ser equívocada, mas se consideramos os quatro vetores de base

$$|\psi_{k\ell}^0\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|0\rangle + |7\rangle) \quad (\text{B.13})$$

$$|\psi_{k\ell}^1\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|3\rangle + |4\rangle) \quad (\text{B.14})$$

$$|\psi_{k\ell}^2\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|1\rangle + |2\rangle) \quad (\text{B.15})$$

$$|\psi_{k\ell}^3\rangle = \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|5\rangle + |6\rangle) \quad (\text{B.16})$$

onde  $\omega = e^{2\pi i/n}$  e  $0 \leq k, \ell \leq n-1$ , conseguimos uma matriz reduzida  $4 \times 4$ .

Devemos então encontrar as matrizes reduzidas  $\tilde{U}_0$  e  $\tilde{U}_1$  para comporem  $\tilde{U} = \tilde{U}_1 \tilde{U}_0$ . Observando a forma como fizemos na seção anterior, temos que a aplicação de  $U_0$  no primeiro vetor de base resulta em

$$U_0 |\psi_{k\ell}^0\rangle = \left( 2 \sum_{x,y} |\alpha_{xy}\langle\alpha_{xy}| - I \right) \frac{1}{n\sqrt{2}} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|0\rangle + |7\rangle) \quad (\text{B.17})$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{x,y,x',y',r,r'=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle |r\rangle \langle xy|x'y'\rangle (\langle r'|0\rangle + \langle r'|7\rangle) - |\psi_{k\ell}^0\rangle \quad (\text{B.18})$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{x,y} \sum_{r=0}^7 \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle |r\rangle - |\psi_{k\ell}^0\rangle \quad (\text{B.19})$$

$$= -\frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^0\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^1\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^2\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^3\rangle \quad (\text{B.20})$$

e, de forma equivalente, este operador nos outros vetores de base são dados por

$$U_0 |\psi_{k\ell}^1\rangle = \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^0\rangle - \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^1\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^2\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^3\rangle \quad (\text{B.21})$$

$$U_0 |\psi_{k\ell}^2\rangle = \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^0\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^1\rangle - \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^2\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^3\rangle \quad (\text{B.22})$$

$$U_0 |\psi_{k\ell}^3\rangle = \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^0\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^1\rangle + \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^2\rangle - \frac{1}{2} |\psi_{k\ell}^3\rangle \quad (\text{B.23})$$

e, portanto, a matriz reduzida  $\tilde{U}_0$  nessa base será

$$\tilde{U}_0 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}.$$

A redução do operador  $\tilde{U}_1$  segue o formato de cálculos já feitos anteriormente. Então temos que  $\tilde{U}_1$  aplicado no primeiro vetor de base será

$$\begin{aligned} U_1 |\psi_{k\ell}^0\rangle &= \left( 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\beta_{xy}^{(0)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(0)}| + |\beta_{xy}^{(1)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(1)}| - I \right) \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|0\rangle + |7\rangle) \\ &= \left( 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\beta_{xy}^{(0)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(0)}| - I \right) \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|0\rangle + |7\rangle) \\ &= \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} (|xy\rangle |0\rangle + |xy\rangle |7\rangle + |x+1, y\rangle |3\rangle + |x+1, y\rangle |4\rangle) - |\psi_{k\ell}^0\rangle \\ &= \omega^{-k} |\psi_{k\ell}^1\rangle \end{aligned}$$

e, quando aplicado no segundo vetor, assume a forma

$$\begin{aligned} U_1 |\psi_{k\ell}^1\rangle &= \left( 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\beta_{xy}^{(0)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(0)}| + |\beta_{xy}^{(1)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(1)}| - I \right) \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|3\rangle + |4\rangle) \\ &= \left( 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\beta_{xy}^{(0)}\rangle \langle \beta_{xy}^{(0)}| - I \right) \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle (|3\rangle + |4\rangle) \\ &= \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{k(x+1)+\ell y} (|x, y\rangle |0\rangle + |x, y\rangle |7\rangle) + \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |x, y\rangle |3\rangle + |x, y\rangle |4\rangle - |\psi_{k\ell}^1\rangle \\ &= \omega^k |\psi_{k\ell}^0\rangle. \end{aligned}$$

Para os outros dois vetores,  $p = 2, 3$ , o forma de calcula é muito parecida. Dessa forma, completamos a decomposição com os vetores

$$U_1 |\psi_{k\ell}^2\rangle = \omega^{-\ell} |\psi_{k\ell}^3\rangle \quad (\text{B.24})$$

$$U_1 |\psi_{k\ell}^3\rangle = \omega^{\ell} |\psi_{k\ell}^2\rangle. \quad (\text{B.25})$$

e a matriz reduzida  $\tilde{U}_1$  é

$$\tilde{U}_1 = \begin{bmatrix} 0 & \omega^k & 0 & 0 \\ \omega^{-k} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega^\ell \\ 0 & 0 & \omega^{-\ell} & 0 \end{bmatrix}$$

e, por fim, temos

$$\tilde{U} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \omega^k & -\omega^k & \omega^k & \omega^k \\ -\omega^{-k} & \omega^{-k} & \omega^{-k} & \omega^{-k} \\ \omega^\ell & \omega^\ell & \omega^\ell & -\omega^\ell \\ \omega^{-\ell} & \omega^{-\ell} & -\omega^{-\ell} & \omega^{-\ell} \end{bmatrix}.$$

# APÊNDICE C – Análise de Fourier em Grade Hexagonal

Nosso esforço é em encontrar uma nova base para o operador de evolução, tal que reduzamos a dimensão da matriz e que facilite a decomposição espectral. Nosso operador original é dado pela expressão

$$U = H_2 H_1 H_0 \quad (\text{C.1})$$

e a matriz reduzida será dada por

$$\tilde{U} = \tilde{H}_2 \tilde{H}_1 \tilde{H}_0. \quad (\text{C.2})$$

Para encontrarmos a matriz reduzida para a grade hexagonal utilizaremos apenas dois vetores de base e que são dados pelas expressões

$$|\psi_{k\ell}^0\rangle = \frac{1}{n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle |0\rangle \quad (\text{C.3})$$

e

$$|\psi_{k\ell}^1\rangle = \frac{1}{n} \sum_{x,y=0}^{n-1} \omega^{kx+\ell y} |xy\rangle |1\rangle. \quad (\text{C.4})$$

Portanto, como temos apenas dois vetores de base, teremos matrizes reduzidas como

$$\tilde{H}_2 = \begin{bmatrix} \tilde{h}_2^{11} & \tilde{h}_2^{12} \\ \tilde{h}_2^{21} & \tilde{h}_2^{22} \end{bmatrix}, \quad \tilde{H}_1 = \begin{bmatrix} \tilde{h}_1^{11} & \tilde{h}_1^{12} \\ \tilde{h}_1^{21} & \tilde{h}_1^{22} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \tilde{H}_0 = \begin{bmatrix} \tilde{h}_0^{11} & \tilde{h}_0^{12} \\ \tilde{h}_0^{21} & \tilde{h}_0^{22} \end{bmatrix}$$

Aplicando  $H_0$  no primeiro vetor de base teremos a seguinte combinação linear

$$H_0 |\psi_{k\ell}^0\rangle = \tilde{h}_0^{11} |\psi_{k\ell}^0\rangle + \tilde{h}_0^{21} |\psi_{k\ell}^1\rangle \quad (\text{C.5})$$

e que irá compor parte de  $\tilde{H}_0$ . Dessa forma, temos que

$$\begin{aligned} H_0 |\psi_{k\ell}^0\rangle &= \left( 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\alpha_{xy}\rangle \langle \alpha_{xy}| - I \right) \frac{1}{n} \sum_{x',y'=0}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} |x'y'\rangle |0\rangle \\ &= \frac{1}{n} \sum_{x,y,x',y'} \omega^{kx'+\ell y'} (|xy\rangle |1\rangle + |x+1, y\rangle |0\rangle) (\langle xy|x'y'\rangle \langle 1|0\rangle + \langle x+1, y|x'y'\rangle \langle 0|0\rangle) - |\psi_{k\ell}^0\rangle \\ &= \frac{1}{n} \sum_{x,y,x',y'} \omega^{kx'+\ell y'} (|xy\rangle |1\rangle + |x+1, y\rangle |0\rangle) \langle x+1, y|x'y'\rangle - |\psi_{k\ell}^0\rangle \end{aligned}$$

e como  $\langle x+1, y|x'y'\rangle = 1$  apenas quando  $x+1 = x'$  e  $y = y'$ , temos

$$\begin{aligned}
 H_0 \left| \psi_{k\ell}^0 \right\rangle &= \frac{1}{n} \sum_{x',y'}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} |x' - 1, y'\rangle |1\rangle + |x' y'\rangle |0\rangle - \left| \psi_{k\ell}^0 \right\rangle \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{x',y'}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} |x' - 1, y'\rangle |1\rangle + \left| \psi_{k\ell}^0 \right\rangle - \left| \psi_{k\ell}^0 \right\rangle \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{x',y'}^{n-1} \omega^{k(x'+1)+\ell y'} |x' y'\rangle |1\rangle \\
 &= \frac{1}{n} \omega^k \sum_{x',y'}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} |x' y'\rangle |1\rangle \\
 &= \omega^k \left| \psi_{k\ell}^1 \right\rangle
 \end{aligned}$$

Para completar a matriz reduzida  $\tilde{H}_0$  temos a aplicação de  $H_0$  no segundo vetor de base  $\left| \psi_{k\ell}^1 \right\rangle$

$$H_0 \left| \psi_{k\ell}^1 \right\rangle = \tilde{h}_0^{11} \left| \psi_{k\ell}^0 \right\rangle + \tilde{h}_0^{21} \left| \psi_{k\ell}^1 \right\rangle \quad (\text{C.6})$$

e que irá compor parte de  $\tilde{H}_0$ . Dessa forma, temos que

$$\begin{aligned}
 H_0 \left| \psi_{k\ell}^1 \right\rangle &= \left( 2 \sum_{x,y=0}^{n-1} |\alpha_{xy}\rangle \langle \alpha_{xy}| - I \right) \frac{1}{n} \sum_{x',y'=0}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} |x' y'\rangle |1\rangle \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{x,y,x',y'}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} (|xy\rangle |1\rangle + |x+1, y\rangle |0\rangle) (\langle xy|x' y'\rangle \langle 1|1\rangle + \langle x+1, y|x' y'\rangle \langle 0|1\rangle) - \left| \psi_{k\ell}^0 \right\rangle \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{x,y,x',y'}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} (|xy\rangle |1\rangle + |x+1, y\rangle |0\rangle) \langle x, y|x' y'\rangle - \left| \psi_{k\ell}^1 \right\rangle
 \end{aligned}$$

e como  $\langle x, y|x' y'\rangle = 1$  apenas quando  $x = x'$  e  $y = y'$ , temos

$$\begin{aligned}
 H_0 \left| \psi_{k\ell}^1 \right\rangle &= \frac{1}{n} \sum_{x',y'}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} |x', y'\rangle |1\rangle + |x' + 1, y'\rangle |0\rangle - \left| \psi_{k\ell}^1 \right\rangle \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{x',y'}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} |x' + 1, y'\rangle |0\rangle + \left| \psi_{k\ell}^1 \right\rangle - \left| \psi_{k\ell}^1 \right\rangle \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{x',y'}^{n-1} \omega^{k(x'-1)+\ell y'} |x' y'\rangle |0\rangle \\
 &= \frac{1}{n} \omega^{-k} \sum_{x',y'}^{n-1} \omega^{kx'+\ell y'} |x' y'\rangle |0\rangle \\
 &= \omega^{-k} \left| \psi_{k\ell}^0 \right\rangle.
 \end{aligned}$$

Dessa forma, somos capazes de montar a primeira matriz reduzida como

$$\tilde{H}_0 = \begin{bmatrix} 0 & \omega^{-k} \\ \omega^k & 0 \end{bmatrix}.$$

O mesmo processo é feito para as matrizes reduzidas  $\tilde{H}_1$  e  $\tilde{H}_2$  e que não difere substancialmente nos cálculos. Encurtando os cálculos, a matriz reduzida  $\tilde{H}_1$  é encontrada pelas aplicações das bases que resultam em

$$\begin{aligned} H_1 |\psi_{k\ell}^0\rangle &= \omega^\ell |\psi_{k\ell}^1\rangle \\ H_1 |\psi_{k\ell}^1\rangle &= \omega^{-\ell} |\psi_{k\ell}^0\rangle \end{aligned}$$

e que possui matriz reduzida

$$\tilde{H}_1 = \begin{bmatrix} 0 & \omega^{-\ell} \\ \omega^\ell & 0 \end{bmatrix}.$$

E, finalizando, temos a matriz reduzida  $\tilde{H}_2$  pelas aplicações

$$\begin{aligned} H_2 |\psi_{k\ell}^0\rangle &= |\psi_{k\ell}^1\rangle \\ H_2 |\psi_{k\ell}^1\rangle &= |\psi_{k\ell}^0\rangle \end{aligned}$$

sendo assim

$$\tilde{H}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

e a matriz reduzida  $\tilde{U} = \tilde{H}_2 \tilde{H}_1 \tilde{H}_0$  é da forma

$$\tilde{U} = \begin{bmatrix} 0 & \omega^{\ell-k} \\ \omega^{-\ell+k} & 0 \end{bmatrix}.$$

## APÊNDICE D – C é $\Theta(\sqrt{\ln n})$

Devemos mostrar que  $C = \Theta(\sqrt{\ln n})$ . Usando as equações (4.54) e (4.55) e identidades trigonométricas obtemos

$$\frac{1}{n^2} \sum_{\substack{k,\ell=0 \\ (k,\ell) \neq (0,0)}}^{\frac{n}{2}-1} \frac{1}{2 + a_{k\ell}} \leq C^2 \leq \frac{4}{n^2} \sum_{\substack{k,\ell=0 \\ (k,\ell) \neq (0,0)}}^{\frac{n}{2}-1} \frac{1}{2 + a_{k\ell}}. \quad (\text{D.1})$$

Pela desigualdade

$$1 - \frac{2\pi^2 k^2}{n^2} \leq \cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right) \leq 1 - \frac{8k^2}{n^2} \quad (\text{D.2})$$

para  $0 \leq k < n/2$  nós temos

$$\frac{1}{3\pi^2} \sum_{\substack{k,\ell=0 \\ (k,\ell) \neq (0,0)}}^{\frac{n}{2}-1} \frac{1}{k^2 + \ell^2 - k\ell} \leq C^2 \leq \frac{1}{12} \sum_{\substack{k,\ell=0 \\ (k,\ell) \neq (0,0)}}^{\frac{n}{2}-1} \frac{1}{k^2 + \ell^2 - k\ell}. \quad (\text{D.3})$$

E pela desigualdade

$$\frac{k^2 + \ell^2}{2} \leq k^2 + \ell^2 - k\ell \leq k^2 + \ell^2, \quad (\text{D.4})$$

podemos encontrar

$$\frac{S(n)}{3\pi^2} \leq C^2 \leq \frac{S(n)}{6} \quad (\text{D.5})$$

onde

$$S(n) = \sum_{\substack{k,\ell=0 \\ (k,\ell) \neq (0,0)}}^{\frac{n}{2}-1} \frac{1}{k^2 + \ell^2}. \quad (\text{D.6})$$

O somatório dado por  $S(n)$  já foi calculado calculado assintoticamente no artigo de [Ambainis, Kempe e Rivosh \(2004\)](#), provando que

$$S(n) = \Theta(\ln n) \quad (\text{D.7})$$

e, portanto,

$$C = \Theta(\sqrt{\ln n}). \quad (\text{D.8})$$