

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

Análise assintótica de passeios quânticos para algoritmos de busca com múltiplos marcados

Pedro Henrique Gasparetto Lugão

Petrópolis, RJ - Brasil

Dezembro de 2023

Pedro Henrique Gasparetto Lugão

**Análise assintótica de passeios quânticos para algoritmos
de busca com múltiplos marcados**

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(es): Renato Portugal

Petrópolis, RJ - Brasil

Dezembro de 2023

XXXX

Gasparetto Lugão, Pedro Henrique

Análise assintótica de passeios quânticos para algoritmos de busca com múltiplos marcados / Pedro Henrique Gasparetto Lugão. – Petrópolis, RJ - Brasil, Dezembro de 2023-

61 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 2023.

1. Busca quântica. 2. Passeios quânticos a tempo discreto. 2. Passeios quânticos a tempo contínuo. I. Portugal, Renato. II. LNCC/MCTIC. III. Título

CDD: XXX.XXX

PEDRO HENRIQUE GASPARETTO LUGÃO

ANÁLISE ASSINTÓTICA DE PASSEIOS QUÂNTICOS PARA ALGORITMOS DE BUSCA COM MÚLTIPLOS MARCADOS

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. Gilson Antônio Giraldi, D.Sc

Prof. Marcos Cesar de Oliveira, D.Sc

Prof. Gabriel de Moraes Coutinho, D.Sc



Documento assinado eletronicamente por **Renato Portugal, Pesquisador Titular**, em 13/12/2023, às 16:07 (horário oficial de Brasília), com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Gilson Antônio Giraldi, Pesquisador Titular**, em 13/12/2023, às 16:09 (horário oficial de Brasília), com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Gabriel de morais coutinho (E), Usuário Externo**, em 13/12/2023, às 18:26 (horário oficial de Brasília), com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Marcos César de Oliveira (E), Usuário Externo**, em 15/12/2023, às 16:00 (horário oficial de Brasília), com



fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://sei.mcti.gov.br/verifica.html>, informando o código verificador **11539755** e o código CRC **4E4ADE4E**.

Referência: Processo nº 01209.000097/2020-39

SEI nº 11539755

Agradecimentos

Agradeço à minha família que sempre me deu apoio mesmo que eu não pudesse estar presente em todos os momentos. Em especial à minha mãe Cláudia e minha irmã Isadora, pela amizade e acolhimento que sempre me deram.

Agradeço à Monaliza, pela companhia e cumplicidade desse último ano de doutorado e em diante que foram fundamentais para tudo que ocorreu. Pelos momentos de paz e serenidade em um período que tinha tudo para ser estressante.

Agradeço aos meus amigos que me acompanharam nessa jornada, desde os que passaram por toda essa experiência comigo até aqueles que estiveram presentes nos demais momentos, de descontração ou desabafos. Ao pessoal do Bloco 8, Rafael, Gustavo, Douglas e Andreza pela companhia ao longo de toda minha trajetória em Petrópolis e além dela. Ao Warley, que mesmo em outro país sempre foi um amigo presente nos mais diversos momentos. À Bruna, pela grande amizade que surgiu em tão pouco tempo e que sei que vou levar para a vida.

Ao professor Renato pela orientação e motivação ao longo desses últimos anos, sem as quais esse projeto não seria possível.

Agradeço ao corpo docente e todos os funcionários do LNCC que contribuíram no meu percurso na pós-graduação. Um agradecimento especial aos envolvidos com o grupo de computação quântica, Gustavo, Jalil, Cauê e Frank, pelas conversas em reuniões e cafés.

Agradeço finalmente a todos os outros pesquisadores que colaboraram com os trabalhos nessa tese de qualquer forma: Hajime Tanaka, Mohamed Sabri, Chris Godsil e Qiuting (Tina) Chen. Incluo também agradecimentos aos pesquisadores que participaram da banca: Gilson Giraldi, Marcos Cesar de Oliveira e Gabriel Coutinho.

*“Einstein said that if quantum mechanics were correct then the world would be crazy.
Einstein was right – the world is crazy.”
Daniel Greenberger*

Resumo

Dado um grafo qualquer é possível definir um operador que representa a evolução de estados respeitando a localidade do grafo. A busca quântica, representada por uma pequena perturbação em alguns nós nesse operador de evolução para marcá-los, se baseia em evoluir o estado quântico por um determinado número de passos até que a probabilidade de encontrar um dos nós marcados seja máxima. Encontrar o número de passos e a probabilidade de sucesso final em grafos de interesse com um número qualquer de marcados é o principal objetivo deste trabalho. Para tal, desenvolvemos um método analítico que obtém uma expressão assintótica no número de nós para as quantidades desejadas a partir da análise de dois autovetores principais da matriz de evolução. O método foi desenvolvido para o caso de passeios discretos e contínuos, com exemplos na malha bidimensional e em grafos de Johnson, respectivamente e ambos com dois elementos marcados. Para um exemplo ainda mais geral é apresentada a análise de passeios contínuos em t -designs, uma abstração matemática que nos gera diferentes grafos bipartidos. Neste último caso obtemos expressões analíticas dependendo não apenas dos parâmetros do grafo, como também do número de marcados. Os exemplos estudados são casos onde não há uma teoria tão precisa a respeito da probabilidade de sucesso e tempo ótimo de passeios quânticos e também mostram o potencial do método desenvolvido para lidar com problemas mais gerais.

Palavras-chave: Busca quântica. Passeios quânticos a tempo discreto. Passeios quânticos a tempo contínuo.

Abstract

Given an arbitrary graph, it is possible to define an operator that represents the evolution of states respecting the graph's locality. Quantum search, represented by a slight perturbation in certain nodes in this evolution operator to mark them, is based on evolving the quantum state for a certain number of steps until the probability of finding one of the marked nodes is maximized. Finding the number of steps and the final success probability in graphs of interest with an arbitrary number of marked nodes is the main objective of this work. To achieve this, we have developed an analytical method that obtains an asymptotic expression in the number of nodes for the desired quantities, based on the analysis of the two leading eigenvectors of the evolution matrix. The method has been developed for both discrete and continuous walk cases, with examples on the two-dimensional lattice and Johnson graphs, each having two marked elements. For an even more general case, we provide an analysis of continuous walks on t -designs, a mathematical abstraction that generates various bipartite graphs. In this latter case, we derive analytical expressions depending not only on the graph's parameters but also on the number of marked nodes. The studied examples cover cases where a precise theory regarding the success probability and optimal time of quantum walks is lacking, showcasing the potential of the developed method to address more general problems.

Keywords: Quantum search. Discrete time quantum walk. Continuous time quantum walk.

Lista de figuras

Figura 1 – Transformação de um grafo completo de 5 nós em seu equivalente bipartido para a formulação de (SZEGEDY, 2004). Elementos destacados em azul representam a base do espaço de Hilbert associado.	19
Figura 2 – Classes de passeios quânticos discretos, figura adaptada de (PORTUGAL; OLIVEIRA; MOQADAM, 2017)	20
Figura 3 – Exemplo de malha bidimensional com $\sqrt{N} = 3$. As arestas pontilhadas indicam a condição de contorno cíclica.	30
Figura 4 – Curvas de probabilidade de sucesso obtidas considerando apenas os dois autovetores de autovalores mais próximos de 1 (que não são 1) pela Equação (3.5). Pontos indicados são as previsões assintóticas.	33
Figura 5 – Curvas de probabilidade de sucesso analíticas representadas por linhas contínuas conforme descritas na Figura 4 e resultados de várias simulações com marcados a diferentes distâncias relativas representados como pontos.	34
Figura 6 – Exemplo de grafo de Johnson com $n = 4$ e $k = 2$, onde os nós representam k -subconjuntos de $[n]$	39
Figura 7 – Comparação entre curva real de probabilidade ao longo do último de passos e previsão analítica utilizando apenas os autovalores de interesse. O eixo x em cada gráfico vai de 0 até $2t_{opt}(N)$, indicando que o máximo de fato é atingido próximo do tempo previsto.	41
Figura 8 – Grafo de incidência G de um 2-design.	45

Lista de tabelas

Tabela 1 – Parâmetros de um t -design	44
---	----

Sumário

1	Introdução	12
2	Passeios quânticos	15
2.1	Computação quântica	15
2.2	Grafos e decomposição espectral	17
2.3	Passeios quânticos	18
2.4	Aplicações com um ou múltiplos marcados	21
2.4.1	Algoritmo de Grover	21
2.4.2	Problema da k -satisfatibilidade booleana	22
2.4.3	Distinção de elementos	23
3	Passeios quânticos a tempo discreto com múltiplos elementos marcados	24
3.1	Análise assintótica	24
3.2	Malha bidimensional	29
3.3	Conclusões parciais	33
4	Passeios quânticos a tempo contínuo com múltiplos elementos marcados	35
4.1	Análise assintótica	35
4.2	Grafos de Johnson	38
4.3	Conclusões parciais	40
5	Busca quântica em t-designs com passeios contínuos	43
5.1	Decomposição espectral de t -designs simétricos	43
5.2	Busca em t -designs	48
5.2.1	Único vértice marcado	48
5.2.2	Múltiplos vértices marcados	49
5.3	Conclusões parciais	55
6	Considerações finais	57
	Referências	58

1 Introdução

Passeios quânticos foram introduzidos como uma alternativa a passeios aleatórios clássicos. Foi observado em (AHARONOV; DAVIDOVICH; ZAGURY, 1993) que o fenômeno quântico permite uma maior dispersão da partícula em relação à sua alternativa clássica. Foi também provado que o passeio quântico consegue simular perfeitamente cadeias de Markov (WATROUS, 2001), bem como obter um resultado quadraticamente mais rápido em relação a uma cadeia de Markov executada em um computador clássico (APERS; SARLETTE, 2019). Estes resultados mostram que o computador quântico e a abordagem de passeios quânticos possuem a capacidade de acelerar algoritmos estocásticos clássicos, em especial os baseados em cadeia de Markov. Além disso, (CHILDS, 2009) mostra que passeios quânticos são um modelo universal na computação quântica. Ou seja, qualquer algoritmo quântico pode ser implementado por passeios quânticos.

Assim como os passos de uma cadeia de Markov discreta no espaço são regidos por uma matriz de transição, em um passeio quântico um passo é representado pela aplicação de uma matriz unitária, que deve ser definida como um operador no espaço de Hilbert cuja base pode ser formada, por exemplo, pelos nós do grafo utilizado. Existem na literatura abordagens de passeios a tempo discreto e contínuo, que podem usar o grafo original (PORTUGAL et al., 2016; CHILDS; GOLDSTONE, 2004) ou um modificado acrescido de um novo espaço para armazenar a direção para onde o caminhante deve andar (chamado de "espaço da moeda") (TREGENNA et al., 2003) ou então uma cópia de cada nó do grafo para gerar um grafo bipartido (SZEGEDY, 2004). Vale notar que as abordagens contínua e discreta não são equivalentes e em determinados grafos como a malha bidimensional obtém-se ganhos a tempo contínuo mas não a tempo discreto (DHEERAJ; BRUN, 2015).

Um problema ligado aos passeios em grafos é o problema de busca, que propõe a existência de elementos marcados em um grafo e questiona o tempo necessário para encontrá-lo executando um passeio clássico ou quântico a partir de uma condição inicial. Existem diversos algoritmos clássicos baseados em problemas de busca por meio de passeios aleatórios, mas vale ressaltar que muitos algoritmos quânticos também podem ser modelados a partir de um problema de busca em um grafo. O algoritmo de Grover (GROVER, 1996) para a busca de um elemento em uma lista não ordenada com uma complexidade $O(\sqrt{N})$, por exemplo, pode ser visto como uma busca em um grafo completo. O algoritmo de *2-distinctness* (AMBAINIS, 2007) para encontrar 2 elementos iguais em uma lista com complexidade $O(N^{2/3})$ é também definido como uma busca em um grafo gerado a partir de subconjuntos da lista com arestas definidas pelo tamanho da interseção entre estes subconjuntos. Embora os trabalhos citados sejam com passeios a tempo discreto, outros trabalhos analisam a busca contínua em grafos específicos, como o completo (CHILDS;

GOLDSTONE, 2004), árvores balanceadas (PHILIPP; TARRATACA; BOETTCHER, 2016), grafos de Johnson (TANAKA; SABRI; PORTUGAL, 2021) e grafos aleatórios (CHAKRABORTY et al., 2017), todos com um único elemento marcado.

Para a realização da busca, modifica-se o operador de evolução (matriz de transição ou a matriz unitária) para adicionar uma assimetria entre os nós marcados e os não marcados e, assim, não permitir que a distribuição uniforme seja estacionária. No caso de cadeias de Markov, algumas abordagens são remover os arcos de saída dos nós marcados ou utilizar uma cadeia de Markov interpolada entre a original e a sem arcos de saída nos marcados. Para passeios quânticos, o operador de evolução original é substituído por um novo operador unitário que age de forma distinta nos marcados e não marcados. Como consequência dessas modificações, ocorre uma oscilação na probabilidade do caminhante estar nos nós marcados ao longo do tempo. O interesse no estudo de algoritmos de busca baseados em passeios aleatórios é entender a dinâmica do operador modificado e encontrar o primeiro instante de tempo onde a probabilidade de encontrar um nó marcado é máxima. Este instante é denominado *hitting time* (HT), e a probabilidade de encontrar o marcado $p(HT)$ determina se o algoritmo realmente funciona. (PORTUGAL, 2018a)

Alguns trabalhos estudaram a dinâmica de passeios quânticos em um grafo genérico com um número arbitrário de elementos marcados. Todos os resultados são assintóticos no número de nós do grafo. Os trabalhos (AMBAINIS et al., 2019) e (APERS et al., 2021) provam que a busca por meio de passeios quânticos gera um ganho quadrático no tempo em relação à busca em passeios aleatórios clássicos a tempo discreto e contínuo, respectivamente. Para realizar esta busca quadraticamente mais rápida, foi necessário executar a dinâmica quântica em uma modificação do grafo original que prevê a cópia de cada nó e a ligação entre os nós do grafo cópia e do original definida pela matriz de adjacência, gerando um grafo bipartido.

Neste trabalho são apresentados métodos para entender a dinâmica de passeios quânticos em grafos específicos com passeios a tempo discreto e contínuo. A maior contribuição está na análise para mais de 1 elemento marcado. Fixando o grafo estudado, os resultados podem ser mais precisos em relação à constante que acompanha o termo dominante da complexidade no tempo. É possível também avaliar se os resultados condizem com a complexidade no tempo proposta na literatura sem a necessidade de gerar um grafo bipartido, o que se caracteriza como um ganho de complexidade no espaço. Além dos métodos, as contribuições incluem análises para três classes de grafos de interesse na literatura: malhas bidimensionais, grafos de Johnson e um subconjunto de grafos bipartidos regulares. Enquanto os dois primeiros exemplos nos dão resultados mais precisos na análise para múltiplos marcados ao mesmo tempo que conferem que existe de fato ganho quadrático no tempo, o terceiro exemplo fornece resultados novos a respeito de como o número de marcados pode influenciar na complexidade.

O trabalho a seguir está organizado da seguinte forma: no Capítulo 2, será dada uma fundamentação teórica de passeios quânticos embasada na literatura. No Capítulo 3, serão apresentados os resultados já publicados em (BEZERRA; LUGÃO; PORTUGAL, 2021) que dizem respeito à análise de buscas quânticas a tempo discreto com um exemplo na malha bidimensional com 2 marcados. No Capítulo 4 será discutido o que ocorre para buscas a tempo contínuo de um modo geral e em um exemplo com grafos de Johnson com 2 marcados, como visto no trabalho pendente para publicação (LUGÃO et al., 2022). No Capítulo 5 será apresentado outro trabalho sobre passeios a tempo contínuo também pendente para publicação (LUGÃO; PORTUGAL, 2023) que busca lidar com um subconjunto da classe de grafos bipartidos e com um número qualquer de vértices marcados. Por fim, o Capítulo 6 sintetiza as contribuições com algumas considerações finais e propostas para o futuro.

2 Passeios quânticos

Neste capítulo faremos uma fundamentação teórica e uma revisão bibliográfica de passeios quânticos, indicando os principais modelos usados e como eles vão servir de base para os trabalhos originais desenvolvidos nos capítulos posteriores.

2.1 Computação quântica

O elemento fundamental da computação quântica é o *qubit*, um sistema quântico isolado que pode assumir qualquer superposição de dois estados básicos: $|0\rangle$ e $|1\rangle$ (lê-se *ket 0* e *ket 1*) (NIELSEN; CHUANG, 2002). Esta superposição pode ser representada de forma vetorial como:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

onde $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ e $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. É possível perceber também que os vetores básicos $|0\rangle$ e $|1\rangle$ são associados aos vetores coluna da base canônica do \mathbb{C}^2 .

Para fins de completude, introduz-se também a notação $\langle\Psi|$ (lê-se *bra psi*) que representa o transposto conjugado do $|\Psi\rangle$. O produto interno entre dois vetores $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ neste espaço é então definido por $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$. Este espaço vetorial complexo munido de um produto interno é também chamado de espaço de Hilbert.

Quando tratamos sistemas quânticos compostos, o espaço em que eles estão contidos é o produto tensorial dos espaços de Hilbert de cada sistema individual. Para formar a base deste novo espaço, tomamos o produto de Kronecker entre os elementos das bases dos espaços menores, definido por:

$$|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \\ \vdots \\ x_n \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 y_1 \\ \vdots \\ x_1 y_m \\ \vdots \\ x_n y_1 \\ \vdots \\ x_n y_m \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Seguindo esta lógica, um sistema composto por 2 qubits possui uma base formada por 4 vetores: $|0\rangle|0\rangle$, $|0\rangle|1\rangle$, $|1\rangle|0\rangle$ e $|1\rangle|1\rangle$, que podem também ser representados pela notação decimal $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$. Estes estados agora correspondem à base canônica do

\mathbb{C}^4 e os valores que os acompanham na superposição que geram um $|\psi\rangle = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle + a_2|2\rangle + a_3|3\rangle$ são chamados de amplitude e devem respeitar $\sum_i |a_i|^2 = 1$.

De um modo geral, pode-se definir a base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |2^n - 1\rangle\}$ que representa os estados possíveis em um sistema de n qubits. Sendo mais preciso, todo estado quântico é então definido como um vetor em um espaço de Hilbert isomorfo ao \mathbb{C}^{2^n} , atentando-se à restrição de normalidade. É importante notar que, embora esta construção gere espaços vetoriais de dimensões iguais a potências de 2, também existe uma generalização de qubits para qudits (WANG et al., 2020) para a obtenção sistemas quânticos de dimensão N para um N qualquer. Por esta razão não precisamos nos limitar de um ponto de vista teórico a espaços com dimensões que são potências de 2.

A restrição de normalidade dos vetores é particularmente importante na definição do postulado da medição. Dado um sistema quântico em superposição isolado do meio externo, o mesmo se colapsa para um dos estados básicos no momento em que é observado.

Outro ponto importante é como realizamos medições em um sistema quântico. Podemos definir um conjunto de operadores de medição $\{M_m\}$ que respeitam $\sum_m M_m^\dagger M_m = I$. Um conjunto bastante comum desses operadores é dado por $M_m = |m\rangle\langle m|$, que se baseia nos elementos da base computacional para realizar a medição. Quando utilizamos este conjunto, dizemos que estamos medindo na base computacional. Os resultados dessa medição são sequências de bits.

Se realizarmos uma medição na base computacional, a probabilidade de se observar um determinado estado a partir de uma superposição $|\psi\rangle = \sum_i a_i |i\rangle$ é dada pelo módulo ao quadrado de sua amplitude. Ou seja, $p(i) = |a_i|^2$.

Após o estado ser observado, parte da informação referente à superposição é perdida e os qubits medidos passam a estar no estado que foi observado com probabilidade de 100%, até que alguma alteração seja feita no sistema.

Além do processo de medição, o sistema quântico também pode ser alterado por outros fenômenos que não envolvam observação do sistema. Respeitando os postulados da mecânica quântica, esta evolução pode ser descrita pela aplicação de uma matriz unitária na representação vetorial do estado quântico.

Uma matriz U é dita unitária se $U^\dagger U = U U^\dagger = I$, onde U^\dagger (lê-se U dagger) é o transposto conjugado de U , também chamado de matriz adjunta. Esta definição implica que $\|U|\psi\rangle\|^2 = \|\psi\|^2$, isto é, a aplicação de U preserva a norma dos vetores. Esta propriedade é importante para garantir que de fato o sistema se mantém em um estado quântico após a aplicação da matriz.

Toda matriz unitária representa uma evolução possível no sistema, e a maioria dos algoritmos se baseia em definir uma matriz unitária que modifica as amplitudes do estado antes de realizar a medição para poder extrair informações a partir do valor medido.

Vale notar que embora este mecanismo de aplicar um operador para manipular probabilidades lembre um processo aleatório clássico, a mecânica quântica não pode ser modelada por um processo de Markov (GILLESPIE, 1994), o que distingue o processo estudado de passeios aleatórios clássicos.

2.2 Grafos e decomposição espectral

Define-se um grafo não direcionado $G = (V, E)$ por um conjunto V de vértices e um conjunto E de arestas, que são conjuntos $\{v_1, v_2\}$ com $v_1, v_2 \in V$. O número de vértices $N = |V|$ é denominada a ordem de um grafo (DIESTEL, 2005). Um grafo pode ser ainda representado pela sua matriz de adjacência $A = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$, onde

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } \{v_i, v_j\} \in E, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.3)$$

Por definição, a matriz de adjacência de um grafo não direcionado é simétrica e por isso possui um conjunto ortonormal de autovetores $\{|\psi_i\rangle\}_{i \in \{1, \dots, N\}}$ tais que $A|\psi_i\rangle = \phi_i|\psi_i\rangle$, onde ϕ_i é o autovalor associado ao autovetor $|\psi_i\rangle$. Além disso, a existência desse conjunto é equivalente à matriz poder ser reescrita pela decomposição espectral:

$$A = \sum_{i \in \{1, \dots, N\}} \phi_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|.$$

Além de A ser simétrica, é também uma matriz real e, portanto, a matriz transposta conjugada de A ainda é A . Chamamos essas matrizes de autoadjuntas ou hermitianas. Matrizes hermitianas possuem apenas autovalores reais. Deste modo, podemos ordenar estes autovalores.

Assumindo que os autovalores estão ordenados da forma $\phi_1 > \phi_2 > \dots > \phi_N$, podemos definir o *gap* espectral de um grafo como a diferença entre os módulos dos dois maiores autovalores da matriz de adjacência, $|\phi_1| - |\phi_2|$. Ainda, o maior módulo dentre os autovalores é chamado de raio espectral.

Informações a respeito da decomposição espectral de grafos específicos são comumente encontradas na literatura (BROUWER; HAEMERS, 2012b), de onde daremos neste trabalho uma atenção especial ao caso da malha bidimensional (PORTUGAL, 2018a) e aos grafos de Johnson (BANNAI; ITO, 1984).

2.3 Passeios quânticos

A cada vértice $v \in V$ pode ser associada uma probabilidade $p(v)$ de algum caminhante estar neste vértice, considerando que $\sum_{v \in V} p(v) = 1$. Tomando este vetor de probabilidades como \vec{p}_0 em um espaço \mathbb{R}^N e dividindo cada linha i da matriz A pelo grau (caso seja não nulo) do i -ésimo vértice para gerar a matriz \bar{A} , é possível definir o próximo passo de um passeio aleatório por $\vec{p}_1 = \bar{A}\vec{p}_0$.

Seguindo o procedimento descrito, é possível obter a evolução da probabilidade de um caminhante estar em um determinado vértice do grafo considerando que a cada instante de tempo ele possui probabilidade igual de ir para qualquer um dos vértices adjacentes.

No caso de passeios quânticos, uma primeira ideia seria associar cada vértice a um elemento da base computacional e representar os estados como superposições. Daí, existem dois pontos importantes a serem notados: primeiro, que as probabilidades na verdade são os quadrados das normas das amplitudes. Logo, os vetores complexos que descrevem o estado do caminhante no grafo devem ter norma L_2 igual a 1. Ainda, vale notar que a medição do estado nos fornece apenas um dos nós do grafo. Nesse sentido, torna-se essencial entender a evolução da probabilidade ao longo dos passos antes de realizar uma medição, para garantir que o nó medido é o procurado.

A maneira como a partir do grafo se constrói a base computacional e como a evolução é feita difere entre diversos trabalhos, dentre os quais alguns serão estudados a seguir para entendermos onde aplicaremos o método desenvolvido, que busca calcular a evolução da probabilidade de se estar em um elemento marcado ao longo de vários passos

Um dos primeiros trabalhos a apresentar o conceito de passeios quânticos é (AHARONOV; DAVIDOVICH; ZAGURY, 1993), onde introduz-se um passeio contínuo no espaço a tempo discreto com uso de uma moeda. Isto se traduz na seguinte modelagem matemática, partindo de um passeio aleatório unidimensional. Seja \mathcal{H} um espaço de Hilbert formado pelo produto tensorial de dois espaços: o primeiro (chamado espaço da moeda) cuja base são os estados $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ e $|-\rangle = (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ e o segundo que representa o espaço de posições possíveis de uma partícula, com sua componente armazenando a distribuição de amplitudes. Deste modo, considere um estado inicial da forma:

$$|\Psi_0\rangle = (c_- |-\rangle + c_+ |+\rangle) |\psi(x_0)\rangle,$$

onde a função $p(x) = |\langle x|\psi(x_0)\rangle|^2$ é uma distribuição de probabilidade centrada em $|x_0\rangle$ e c_-, c_+ são pesos complexos que respeitam a restrição de normalização $|c_-|^2 + |c_+|^2 = 1$.

É então apresentado um operador unitário $U(l)$ (onde l é um parâmetro de deslocamento) que, ao ser aplicado no estado atual, gera um deslocamento na distribuição de probabilidade da partícula guiado pelo sinal no espaço da moeda. Após uma aplicação,

obtém-se o seguinte estado:

$$|\Psi_1\rangle = c_- |-\rangle |\psi(x_0 - l)\rangle + c_+ |+\rangle |\psi(x_0 + l)\rangle.$$

A partir desta dinâmica, os autores observam que o procedimento de medir a componente da moeda e repetir o processo faz a dinâmica se igualar a um passeio aleatório clássico. Em seguida, é apresentada uma reformulação que utiliza uma moeda diferente e diferentes operadores de medição baseados nos *spins* nas partículas para acelerar o procedimento e concluir que o deslocamento gerado por um passeio quântico alcança posições fora dos limites clássicos. Embora esse trabalho trate uma aplicação específica de um átomo em um espaço unidimensional, abordagens teóricas mais recentes permitem um tratamento um pouco mais geral do problema se inspirando no espaço da moeda a tempo discreto (TREGENNA et al., 2003).

Com o objetivo de definir o passeio em um grafo geral e garantir um ganho na complexidade, (SZEGEDY, 2004) considera um grafo $G(V, E)$ e define um espaço cuja base são os pares em $V \times V$. Fazendo uma analogia com o passeio com moeda, pode-se considerar que o primeiro elemento do par $|i\rangle |j\rangle$ é a posição de uma partícula no grafo (visto que $|i\rangle$ é um elemento em V) e a segunda posição representa a direção para onde a partícula será deslocada, como indicaria uma moeda. Outra interpretação possível é que os pares representam as arestas direcionadas, e o passeio ocorre saltando entre arestas. Independente da interpretação, é importante notar que a dinâmica ocorre em um grafo bipartido, uma vez que há uma replicação de todos os nós de V para compor o par e as arestas geradas entre as duas partes da partição replicam as arestas do grafo original. A Figura 1 representa como esta transformação pode ser vista, indicando todos os elementos da base de Hilbert a serem considerados caso o grafo original estivesse sendo mantido e usando a formulação proposta pelos autores.

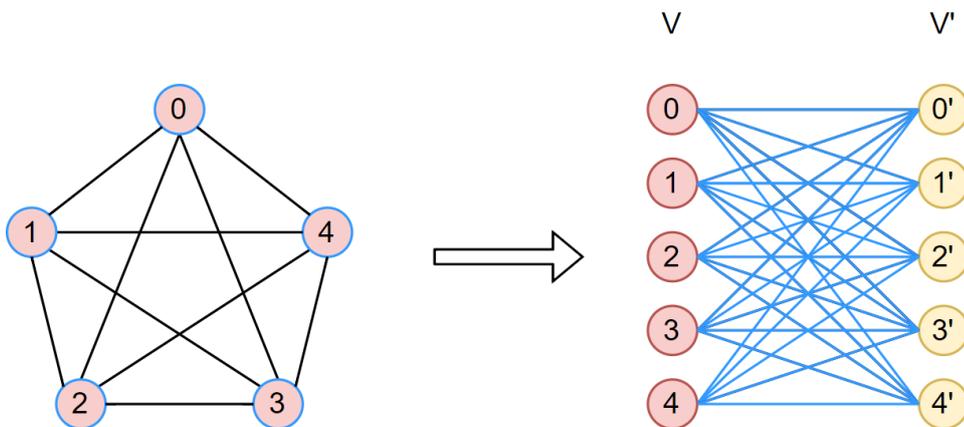


Figura 1 – Transformação de um grafo completo de 5 nós em seu equivalente bipartido para a formulação de (SZEGEDY, 2004). Elementos destacados em azul representam a base do espaço de Hilbert associado.

Com este espaço bipartido aumentado e usando um operador de evolução a tempo discreto que codifica a matriz de adjacência do grafo e marca todas as arestas que saem dos nós buscados, os autores concluem que sob certas condições uma busca quântica no grafo modificado possui um ganho quadrático no tempo em relação a uma busca clássica no grafo original. Em uma malha bidimensional $n \times n$ com condições de fronteira cíclica, por exemplo, em um passeio clássico um nó pode ser encontrado em $n^2 \log(n)$, enquanto no passeio quântico proposto pode ser encontrado em $n\sqrt{\log(n)}$ passos com probabilidade $1/\log n$. A estratégia de Szegedy é usada em (AMBAINIS et al., 2019) para provar que um ganho quadrático (ignorando termos logarítmicos) ocorre em um grafo qualquer com um número qualquer de marcados a tempo discreto caso o mesmo se baseie em uma cadeia de Markov ergódica reversível e seja transformado em sua versão bipartida.

Um modelo de busca quântica a tempo discreto mais geral é visto em (PORTUGAL et al., 2016), que faz uso de diferentes operadores de evolução para codificar os movimentos que uma partícula podem fazer em um grafo. Desse modo, consegue realizar o passeio no grafo a tempo discreto sem ser necessário uma extensão do espaço de Hilbert para indicar a aresta escolhida. Os autores demonstram que o passeio de (SZEGEDY, 2004) é um caso particular deste modelo, indicando que não só engloba o caso onde há garantia de um ganho quadrático, como também possibilita a definição de outros casos a serem melhor estudados. O passeio com moeda possui interseção com a classe de passeios ditos *Staggered*, e também engloba parte do modelo de Szegedy. Visualmente, ocorre o visto na Figura 2 em relação a passeios discretos, e apenas o passeio de Szegedy está completamente resolvido no contexto de algoritmos de busca.

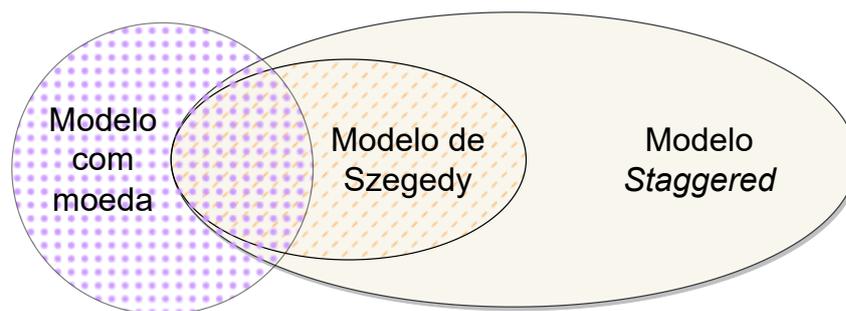


Figura 2 – Classes de passeios quânticos discretos, figura adaptada de (PORTUGAL; OLIVEIRA; MOQADAM, 2017)

Em relação a passeios a tempo contínuo, o modelo de Childs (CHILDS; GOLDSTONE, 2004) elimina a necessidade de uma extensão do espaço e trabalha apenas com os nós do grafo formando um espaço de Hilbert, podendo fazer uso da matriz de adjacência original A . Deste modo, o operador de evolução é obtido a partir da exponenciação de um hamiltoniano $\mathcal{H} = -\gamma A - \sum_{w \in W} |w\rangle \langle w|$, dado pela matriz de adjacência de um grafo com perturbações num conjunto de nós W que devem ser encontrados. Os autores avaliam o desempenho da busca sob essas configurações com um único elemento marcado

e concluem que há um ganho quadrático em malhas com dimensão grande o suficiente ($d > 4$), mostrando também como seu método de análise funciona no grafo completo e no hipercubo, onde o valor γ a ser multiplicado pela matriz de adjacência é escolhido de modo que haja equilíbrio entre as sobreposições dos estados de interesse (o inicial e o marcado) com o estado fundamental e o primeiro estado excitado do Hamiltoniano (autovetores com autovalores de menor módulo). Deste modo, o passeio contínuo promove a transição entre o estado inicial e marcado em um tempo de ordem inversamente proporcional ao *gap* espectral. Nota-se que o método deve ser aplicado a cada grafo separadamente, e o ganho depende das propriedades do grafo. Observa-se, por exemplo, que malhas com dimensão menor que 4 não são capazes de obter ganho quadrático no modelo proposto.

O trabalho de (APERS et al., 2021) se propõe a resolver a busca quântica contínua no tempo. Para isto, realiza um procedimento similar ao de (AMBAINIS et al., 2019), criando um novo grafo bipartido (ver Figura 1) a partir de um original e realizando uma busca contínua neste novo espaço. Os autores concluem que é possível obter um ganho quadrático ignorando termos logarítmicos a partir de qualquer passeio clássico enxergando-os como uma cadeia de Markov ergódica reversível. Para este trabalho o número de marcados não interfere no resultado, mas as complexidades obtidas são dadas apenas pela ordem de grandeza. Assim, não é possível comparar diferentes configurações de marcados em um mesmo grafo.

2.4 Aplicações com um ou múltiplos marcados

2.4.1 Algoritmo de Grover

Se quisermos observar como o número de marcados afeta ao menos o termo dominante da complexidade, temos na literatura como exemplo mais estudado o caso do grafo completo a tempo discreto, que é uma forma de descrever o algoritmo de Grover para busca em uma base não ordenada (GROVER, 1996).

Seja \mathcal{H} um espaço de Hilbert de base $\{|0\rangle, |2\rangle, \dots, |N-1\rangle\}$. O objetivo do algoritmo de Grover é encontrar um elemento específico dessa base após a medição. Para isto, preparamos o estado inicial

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle. \quad (2.4)$$

Em seguida, definimos os operadores:

$$G = 2|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0| - \mathbf{I}, \quad (2.5)$$

$$U_f = \mathbf{I} - 2|0\rangle\langle 0|, \quad (2.6)$$

considerando $|0\rangle$ como o elemento buscado. Em seguida aplicamos GU_f de forma consecutiva $t_{\text{opt}} = \left\lfloor \frac{\pi}{4} \sqrt{N} \right\rfloor$ vezes ao estado inicial.

Ao realizar uma medição após a execução deste algoritmos, obtemos o estado 0 com probabilidade $p_{\text{succ}} = 1 - \frac{1}{N}$. Ou seja, a probabilidade tende a 1 quando $N \rightarrow \infty$ (assintoticamente) e o tempo para que isto ocorra é quadraticamente mais rápido que uma busca clássica, que no pior caso teria que percorrer os N elementos da base.

Caso queiramos obter qualquer elemento da base em um conjunto M , podemos modificar o operador U_f da seguinte forma:

$$U_f = I - 2 \sum_{w \in M} |w\rangle \langle w|.$$

Sabe-se que neste caso, se existirem m elementos marcados há um ganho na complexidade. O número de passos exigidos e a probabilidade de sucesso passam a ser $t_{\text{opt}} = \frac{\pi\sqrt{N}}{4\sqrt{m}}$ e $p_{\text{succ}} = 1 - \frac{M}{N}$, respectivamente (BOYER et al., 1998). Portanto, múltiplos elementos marcados em um passeio discreto no grafo completo geram uma redução no tempo ótimo da ordem de \sqrt{m} . Sendo m fixo, o tempo ótimo é ainda $O(\sqrt{N})$ e portanto a notação de *big-O* usada em outros trabalhos para definir complexidade não captura essa diferença. O que podemos dizer a respeito desse termo dominante em outros grafos, ou a tempo contínuo? Esta é a pergunta que este trabalho busca responder.

2.4.2 Problema da k -satisfatibilidade booleana

Seja dada uma expressão lógica que envolva k variáveis booleanas da forma:

$$f(x_1, \dots, x_k) = (a_{1,1}x_1 \vee \dots \vee a_{1,n}x_n) \wedge \dots \wedge (a_{m,1}x_1 \vee \dots \vee a_{m,n}x_n),$$

onde $a_{i,j} \in \{-1, 0, 1\}$. Uma aplicação direta do algoritmo de Grover envolve construir um oráculo que codifica a expressão booleana acima e busca uma combinação de variáveis que ative este oráculo.

A construção se dá a partir de portas Toffoli generalizadas para codificar cada uma das m disjunções, que são ativadas em um qubit auxiliar quando a disjunção é falsa. Cada disjunção dá origem a um qubit auxiliar e esses qubits são também ligados por uma Toffoli que ativa quando todos os qubits auxiliares permaneceram no estado $|0\rangle$. Deste modo, o qubit que recebe essa última porta só é ativada caso nenhuma das disjunções for falsa, ou seja, quando encontrarmos uma combinação de variáveis que satisfaça a expressão. (DANTSIN; KREINOVICH; WOLPERT, 2005; PORTILHEIRO, 2018).

Ao utilizar este oráculo no algoritmo de Grover, encontramos uma solução que satisfaz a expressão em até $2^{n/2}$ passos, quadraticamente mais rápido do que realizar uma busca clássica. Embora este algoritmo não resolva a versão de decisão da SAT (se há ou não uma solução que satisfaça a expressão), mostra que a busca pode ser feita de forma mais eficiente e resolve a versão da SAT que garante a existência de ao menos uma solução.

Note que neste caso o oráculo pode marcar mais de uma solução e a análise do Grover para múltiplos marcados também é aplicada aqui.

2.4.3 Distinção de elementos

O problema de distinção de elementos consiste em determinar se todos os elementos de uma lista são distintos. Por exemplo, seja uma lista $X = [4, 2, 1, 2, 0]$. Há uma colisão nas posições 2 e 4 da lista, pois ambas possuem o valor 2. Deste modo, a resposta para a pergunta seria "não, não são distintos". Este problema pode ser simplificado assumindo que ou teremos uma colisão entre duas posições ou não teremos colisão. Quando é possível colisão entre k posições estamos lidando com o problema chamado *k-distinctness*. O modelo que exploraremos (AMBAINIS, 2007) é focado no *2-distinctness* e pode ser generalizado para outros valores de k , mas não garante a otimalidade nestes casos.

Seguindo a modelagem de (PORTUGAL, 2018a), seja $f : \{1, \dots, N\} \rightarrow X$ uma função que retorna o i -ésimo elemento da lista X . Queremos determinar as duas entradas i_1, i_2 tais que $f(i_1) = f(i_2)$. Definimos:

$$[N] = \{1, \dots, N\}, \quad (2.7)$$

$$r = \lfloor N^{2/3} \rfloor, \quad (2.8)$$

$$S_r = \{S \subset N; |S| = r\}, \quad (2.9)$$

$$\mathcal{V} = \{(S, y); S \in S_r, y \in [N] \setminus S\}. \quad (2.10)$$

Cada elemento de \mathcal{V} é visto como um nó de um grafo, de modo que estabelecemos dois tipos de arestas que conectam esses nós. Conectamos primeiramente (S, y) e (S', y') se $S = S'$. Além disso, também conectamos os pares de nós (S, y) e (S', y') se $S \cup \{y\} = S' \cup \{y'\}$. Para definir a busca neste grafo, marcamos todos os nós tais que os $\{i_1, i_2\} \subset S$.

Os operadores de evolução definidos neste passeio seguem o modelo *staggered* (PORTUGAL et al., 2016), alternando entre os dois tipos de arestas discutidos anteriormente. Após o passeio evoluindo as amplitudes ao mesmo tempo que marca os nós de interesse, um nó (S, y) com S contendo os índices marcados é encontrado em $O(r)$ passos com probabilidade $O(1)$.

Um ponto interessante a respeito da análise vista em (AMBAINIS, 2007; PORTUGAL, 2018a) é que, apesar de termos vários elementos marcados e este exemplo ser uma aplicação onde também precisamos considerar isso, toda a análise é feita lidando com um espaço reduzido onde apenas uma das dimensões desse espaço é marcada. Entretanto, não é em toda aplicação que haverá este espaço reduzido e os trabalhos a seguir focam em lidar com essa questão sem precisar de tal garantia.

3 Passeios quânticos a tempo discreto com múltiplos elementos marcados

Neste capítulo apresentaremos a análise da dinâmica de busca com muitos marcados em passeios quânticos a tempo discreto com um exemplo na malha bidimensional com dois marcados.

A principal ideia por trás da nossa metodologia proposta em (BEZERRA; LUGÃO; PORTUGAL, 2021) é expressar a probabilidade de encontrar um elemento marcado em uma busca quântica como resultado da sobreposição do vetor de marcados com apenas dois autovetores principais (técnica conhecida por *principal eigenvalue method*). Para tal, é necessário que assintoticamente a sobreposição dos marcados com os demais autovetores seja zero (ou um valor constante). Resultados numéricos ao fim da utilização do método são capazes de indicar se a condição foi ou não violada.

Em resumo, neste capítulo vamos detalhar e utilizar o seguinte resultado:

Seja U uma matriz de evolução que representa o passeio em um grafo $G(V, E)$ com condição inicial $|\Psi_0\rangle$ e $R = I - 2 \sum_{m \in M} |m\rangle \langle m|$ um operador que marca os nós $m \in M \subset V(G)$. Sejam ainda $e^{i\lambda}$ e $e^{i\lambda'}$ os autovalores de $U' = UR$ mais próximos de 1 (mas diferentes de 1).

Se a dinâmica ocorrer assintoticamente apenas no plano gerado por $\{|\lambda\rangle, |\lambda'\rangle\}$, a probabilidade de encontrar um marcado pode ser descrita aproximadamente por

$$p(t) \approx \sum_{m \in M} |e^{i\lambda t} \langle m|\lambda\rangle \langle \lambda|\Psi_0\rangle + e^{i\lambda' t} \langle m|\lambda'\rangle \langle \lambda'|\Psi_0\rangle|^2. \quad (3.1)$$

Ainda, se $\lambda = -\lambda'$ e $\langle m|\lambda\rangle \langle \lambda|\Psi_0\rangle = -\langle m|\lambda'\rangle \langle \lambda'|\Psi_0\rangle$ para todo m , temos:

$$p(t) \approx \sin^2(t\lambda) \left(4 \sum_{m \in M} |\langle m|\lambda\rangle \langle \lambda|\Psi_0\rangle|^2 \right), \quad (3.2)$$

de onde são diretamente extraídos $t_{opt} = \pi/(2\lambda)$ e $p_{succ} = 4 \sum_{m \in M} |\langle m|\lambda\rangle \langle \lambda|\Psi_0\rangle|^2$.

3.1 Análise assintótica

Considere uma matriz de evolução U que a tempo discreto representa o passeio em um grafo $G(V, E)$ (tendo como únicas restrições a princípio ser unitária e respeitar localidade). Seja também $R = I - 2 \sum_{m \in M} |m\rangle \langle m|$ uma matriz que inverte o sinal de todos os vetores da base que representam nós $m \in M \subset V(G)$ e mantém inalterados os demais. Para entender a dinâmica de busca, deve-se considerar a aplicação do operador modificado

$U' = UR$ repetidamente até completar t_f passos a partir de uma condição inicial $|\Psi_0\rangle$. A probabilidade de encontrar um elemento marcado ao fim do passeio é dada por

$$p(t) = \sum_{m \in M} |\langle m | (U')^t | \Psi_0 \rangle|^2. \quad (3.3)$$

Todas as matrizes aqui consideradas são unitárias e, logo, possuem uma base de autovetores ortonormais. Considerando $|\lambda\rangle$ e $|\lambda'\rangle$ os autovetores cujos autovalores são os mais próximos de 1 (mas diferentes de 1), podemos destacá-los da decomposição espectral e escrever U' como

$$U' = e^{i\lambda} |\lambda\rangle \langle \lambda| + e^{i\lambda'} |\lambda'\rangle \langle \lambda'| + U_{\text{tiny}}, \quad (3.4)$$

onde λ e λ' são as fases dos autovalores de $|\lambda\rangle$ e $|\lambda'\rangle$, respectivamente, e U_{tiny} é a matriz construída pelos autovetores e autovalores restantes. A primeira hipótese importante a ser considerada é que toda a dinâmica acontece assintoticamente no plano gerado por $\{|\lambda\rangle, |\lambda'\rangle\}$, o que implica em

$$p(t) = \sum_{m \in M} |e^{i\lambda t} \langle m | \lambda \rangle \langle \lambda | \Psi_0 \rangle + e^{i\lambda' t} \langle m | \lambda' \rangle \langle \lambda' | \Psi_0 \rangle + \epsilon_m|^2, \quad (3.5)$$

com $\epsilon_m = \langle m | U_{\text{tiny}}^t | \Psi_0 \rangle$ podendo ser desconsiderado conforme o número nós N cresce. O exemplo que será trabalhado na malha bidimensional respeita $|\epsilon_m| \rightarrow 0$ quando $N \rightarrow \infty$, mas um $|\epsilon_m|$ constante ainda permitiria a análise da dinâmica (com um fator de erro constante). Note que este tipo de hipótese é também comumente considerada na análise para um único elemento marcado (PORTUGAL, 2018a), desconsiderando o somatório em M .

Desconsiderando a contribuição de ϵ_m , ainda são necessários alguns valores para obtermos uma aproximação para a curva de probabilidade e assim calcularmos a complexidade: as fase λ e os produtos internos $\langle m | \lambda \rangle$ e $\langle \lambda | \Psi_0 \rangle$, além das mesmas quantidades relativas ao λ' . Não é trivial obter uma expressão analítica para a esses termos da decomposição espectral de U' em um caso geral. Logo, mostraremos como encontrar esses valores a partir da decomposição espectral de U .

Tome $\{|\Psi_k\rangle\}_{k \in \{1, \dots, n\}}$ uma base de autovetores da matriz de evolução U , associada ao conjunto de fases dos autovalores $\{\phi_k\}_{k \in \{1, \dots, n\}}$, onde $U |\Psi_k\rangle = e^{i\phi_k} |\Psi_k\rangle \forall k$. O fato da base ser ortonormal implica em

$$\langle m | \lambda \rangle = \sum_k \langle m | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | \lambda \rangle. \quad (3.6)$$

Note agora que

$$\langle \Psi_k | U' | \lambda \rangle = e^{i\lambda} \langle \Psi_k | \lambda \rangle, \quad (3.7)$$

mas

$$\langle \Psi_k | U' | \lambda \rangle = \langle \Psi_k | UR | \lambda \rangle \quad (3.8)$$

$$= (\langle \Psi_k | U) \left(I - 2 \sum_{m \in M} |m\rangle \langle m| \right) | \lambda \rangle \quad (3.9)$$

$$= e^{i\phi_k} \langle \Psi_k | \lambda \rangle - 2e^{i\phi_k} \sum_{m \in M} \langle \Psi_k | m \rangle \langle m | \lambda \rangle. \quad (3.10)$$

Igualando as duas expressões encontradas:

$$e^{i\lambda} \langle \Psi_k | \lambda \rangle = e^{i\phi_k} \langle \Psi_k | \lambda \rangle - 2e^{i\phi_k} \sum_{m \in M} \langle \Psi_k | m \rangle \langle m | \lambda \rangle, \quad (3.11)$$

$$\langle \Psi_k | \lambda \rangle = \frac{2}{e^{i(\lambda - \phi_k)} - 1} \sum_{m \in M} \langle \Psi_k | m \rangle \langle m | \lambda \rangle, \quad (3.12)$$

$$\langle \Psi_k | \lambda \rangle = (1 + ib_k^\lambda) \sum_{m \in M} \langle \Psi_k | m \rangle \langle m | \lambda \rangle, \quad (3.13)$$

onde $b_k^\lambda = \frac{\sin(\lambda - \phi_k)}{1 - \cos(\lambda - \phi_k)}$. A última passagem pode ser obtida multiplicando a fração por $1 = \frac{1 - e^{i(\lambda - \phi_k)}}{1 - e^{i(\lambda - \phi_k)}}$.

Substituindo a Equação (3.13) na Equação (3.6), obtém-se:

$$\langle m | \lambda \rangle = \sum_k \langle m | \Psi_k \rangle (1 + ib_k^\lambda) \sum_{m' \in M} \langle \Psi_k | m' \rangle \langle m' | \lambda \rangle, \quad (3.14)$$

$$\langle m | \lambda \rangle = \langle m | \lambda \rangle + \sum_k \langle m | \Psi_k \rangle ib_k^\lambda \sum_{m' \in M} \langle \Psi_k | m' \rangle \langle m' | \lambda \rangle, \quad (3.15)$$

$$0 = \sum_{m' \in M} \left(\sum_k b_k^\lambda \langle m | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | m' \rangle \right) \langle m' | \lambda \rangle, \quad (3.16)$$

$$0 = \sum_{m' \in M} \Lambda_{mm'}^\lambda \langle m' | \lambda \rangle, \quad (3.17)$$

$$0 = \Lambda^\lambda |u\rangle, \quad (3.18)$$

ou seja, a matriz Λ^λ de dimensão $|M| \times |M|$ cujos elementos são dados por $\Lambda_{mm'}^\lambda = \sum_k b_k^\lambda \langle m | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | m' \rangle$ possui um autovetor $|u\rangle$ de autovalor 0 formado pelos valores $(\langle m | \lambda \rangle)_{m \in M}$. A existência deste 0-autovetor implica em

$$\det \Lambda^\lambda = 0, \quad (3.19)$$

de onde podem ser extraídos os valores λ e λ' como as duas raízes mais próximas de zero dessa equação em λ . Um caso particular é $\lambda = -\lambda$, que ocorre quando a matriz U é real.

Após a obtenção de λ , os valores da forma $\langle m | \lambda \rangle$ podem ser recuperados a partir do 0-autovetor da matriz Λ^λ . Atente-se apenas ao fato que o autovetor $|u\rangle$ encontrado pode ser um múltiplo do vetor com as coordenadas desejadas. Para corrigir isso, é necessário

multiplicar o valor por uma constante real α que gere $(\langle m|\lambda\rangle)_{m\in M} = \alpha |u\rangle$. A escolha do α é feita utilizando a Equação (3.13) na restrição

$$\sum_k |\langle \Psi_k|\lambda\rangle|^2 = \sum_k \langle \lambda|\Psi_k\rangle \langle \Psi_k|\lambda\rangle = \langle \lambda|\lambda\rangle = 1. \quad (3.20)$$

Basta escolher o α que gere um vetor $(\langle m|\lambda\rangle)_{m\in M}$ respeitando a restrição.

Por fim, a última peça restante são os termos da forma $\langle \lambda|\Psi_0\rangle$, que podem ser obtidos a partir da Equação (3.13) tomando $|\Psi_0\rangle$ um 1-autovetor de U , por exemplo. Vale notar que para grafos regulares a distribuição uniforme é sempre um 1-autovetor.

Um caso muito interessante surge nos casos onde $\lambda = -\lambda'$ e $\langle m|\lambda\rangle \langle \lambda|\Psi_0\rangle = -\langle m|\lambda'\rangle \langle \lambda'|\Psi_0\rangle$ para todo m , pois a Equação (3.5) se simplifica ao ignorarmos a contribuição ϵ_m e considerarmos a diferença dos valores complexos conjugados restantes:

$$p(t) = \sum_{m\in M} |e^{i\lambda t} \langle m|\lambda\rangle \langle \lambda|\Psi_0\rangle - e^{-i\lambda t} \langle m|\lambda\rangle \langle \lambda|\Psi_0\rangle|^2 \quad (3.21)$$

$$= \sum_{m\in M} |2i \sin(t\lambda) \langle m|\lambda\rangle \langle \lambda|\Psi_0\rangle|^2 \quad (3.22)$$

$$= \sin^2(t\lambda) \left(4 \sum_{m\in M} |\langle m|\lambda\rangle \langle \lambda|\Psi_0\rangle|^2 \right). \quad (3.23)$$

Pela equação acima, notamos que t precisa ser escolhido de modo a maximizar o senoide ao quadrado, ou seja, $t_{opt} = \pi/(2\lambda)$ e a probabilidade de sucesso nesse tempo ótimo passa a ser $p_{succ} = 4 \sum_{m\in M} |\langle m|\lambda\rangle|^2 |\langle \lambda|\Psi_0\rangle|^2$.

Após detalharmos a técnica de forma geral, é possível especificá-la para um número fixo de marcados, de modo que a Equação (3.19) possa ser melhor trabalhada.

Tome $M = \{|m_0\rangle, |m_1\rangle\}$, ou seja, $|M| = 2$. Assim, a matriz Λ^λ possui dimensão 2×2 e seu determinante pode ser explicitado da forma

$$\Lambda_{m_0 m_0}^\lambda \Lambda_{m_1 m_1}^\lambda - \Lambda_{m_0 m_1}^\lambda \Lambda_{m_1 m_0}^\lambda = 0. \quad (3.24)$$

Podemos reescrever como um somatório duplo:

$$\sum_{kk'} b_k^\lambda b_{k'}^\lambda c_{kk'} = 0, \quad (3.25)$$

onde

$$c_{kk'} = \Psi_k(m_0) \Psi_{k'}(m_1) (\Psi_k^*(m_0) \Psi_{k'}^*(m_1) - \Psi_k^*(m_1) \Psi_{k'}^*(m_0)). \quad (3.26)$$

Vale notarmos neste ponto que normalmente quando aumentamos o número de nós N temos que os autovalores mais próximos de 1 se aproximam de 1 pois a perturbação fica cada vez menor e eles se aproximam do autovalor da matriz não perturbada. Deste modo,

a fase λ vai para 0 assintoticamente. Assim, é justa a suposição que $\lambda \ll |\phi_k| \forall k$ quando N cresce, nos permitindo fazer uso de séries de Taylor em λ nas funções trigonométricas que aparecem em b_λ^k . Para tal, vamos dividir o somatório duplo em 4 partes:

$$\sum_{kk'} = \sum_{\substack{\phi_k=0 \\ \phi_{k'}=0}} + \sum_{\substack{\phi_k=0 \\ \phi_{k'} \neq 0}} + \sum_{\substack{\phi_k \neq 0 \\ \phi_{k'}=0}} + \sum_{\substack{\phi_k \neq 0 \\ \phi_{k'} \neq 0}}, \quad (3.27)$$

que dividem as combinações possíveis com $\phi_k = 0$ e $\phi_k \neq 0$. Usando

$$\frac{\sin \lambda}{1 - \cos \lambda} = \frac{2}{\lambda} + O(\lambda) \quad (3.28)$$

e, se $\phi_k \neq 0$,

$$\frac{\sin(\lambda - \phi_k)}{1 - \cos(\lambda - \phi_k)} = a_k \sin \phi_k + a_k \lambda + O(\lambda^2), \quad (3.29)$$

onde

$$a_k = \frac{1}{\cos \phi_k - 1}, \quad (3.30)$$

obtemos

$$\frac{A}{\lambda^2} + \frac{B}{\lambda} + C + D\lambda + E\lambda^2 = O(\lambda^3), \quad (3.31)$$

onde

$$A = 4 \sum_{\substack{\phi_k=0 \\ \phi_{k'}=0}} c_{kk'}, \quad (3.32)$$

$$B = 2 \sum_{\substack{\phi_k=0 \\ \phi_{k'} \neq 0}} a_{k'} c_{kk'} \sin \phi_{k'} + 2 \sum_{\substack{\phi_k \neq 0 \\ \phi_{k'}=0}} a_k c_{kk'} \sin \phi_k, \quad (3.33)$$

$$C = 2 \sum_{\substack{\phi_k=0 \\ \phi_{k'} \neq 0}} a_{k'} c_{kk'} + 2 \sum_{\substack{\phi_k \neq 0 \\ \phi_{k'}=0}} a_k c_{kk'} + \sum_{\substack{\phi_k \neq 0 \\ \phi_{k'} \neq 0}} a_k a_{k'} c_{kk'} \sin \phi_k \sin \phi_{k'}, \quad (3.34)$$

$$D = \sum_{\substack{\phi_k \neq 0 \\ \phi_{k'} \neq 0}} a_k a_{k'} c_{kk'} (\sin \phi_k + \sin \phi_{k'}), \quad (3.35)$$

$$E = \sum_{\substack{\phi_k \neq 0 \\ \phi_{k'} \neq 0}} a_k a_{k'} c_{kk'}. \quad (3.36)$$

Reduzimos assim o problema de encontrar λ nos casos onde $|M| = 2$ ao problema de resolver os somatórios acima e entender como eles se comportam na Equação (3.31).

Usando que $(\langle m_0 | \lambda \rangle, \langle m_1 | \lambda \rangle)^T$ é um 0-autovetor de Λ^λ , obtemos

$$\langle m_0 | \lambda \rangle = \alpha \Lambda_{m_0 m_1}^\lambda \quad (3.37)$$

$$\langle m_1 | \lambda \rangle = -\alpha \Lambda_{m_0 m_0}^\lambda, \quad (3.38)$$

onde α é o fator de correção que calculamos usando da forma previamente descrita respeitando determinadas condições, gerando:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha^2} &= (1 + \Lambda'_{m_1 m_1}) \left(\Lambda_{m_0 m_0}^\lambda \right)^2 - 2 \Lambda_{m_0 m_0}^\lambda \Re \left\{ \Lambda'_{m_0 m_1} \Lambda_{m_0 m_1}^\lambda \right\} \\ &\quad + (1 + \Lambda'_{m_0 m_0}) \left| \Lambda_{m_0 m_1}^\lambda \right|^2, \end{aligned} \quad (3.39)$$

onde \Re é o operador que extrai a parte real de um número complexo,

$$\Lambda_{mm'}^\lambda = \sum_k b_k^\lambda \Psi_k(m) \Psi_k^*(m'), \quad (3.40)$$

e

$$\Lambda'_{mm'} = \sum_k (b_k^\lambda)^2 \Psi_k(m) \Psi_k^*(m'). \quad (3.41)$$

Discutiremos o caso onde podemos calcular essas quantidades com um exemplo na malha bidimensional.

3.2 Malha bidimensional

Dois passeios com moeda são explorados em (BEZERRA; LUGÃO; PORTUGAL, 2021): na malha bidimensional e no hipercubo. No caso de passeios com moeda, trabalha-se no produto tensorial de dois espaços, o do grafo e o da moeda. Assim, os operadores unitários agem em vetores da forma $|x\rangle |c\rangle$, com $|x\rangle \in V(\Gamma)$ e $|c\rangle \in C$, onde C é o espaço da moeda. O passeio na malha e os valores de interesse obtidos de modo assintótico são descritos a seguir.

Considere uma malha bidimensional com \sqrt{N} colunas e \sqrt{N} linhas. As arestas conectam vizinhos pela diagonal, assumindo uma condição de contorno cíclica. Um exemplo de uma malha 3×3 pode ser visto na Figura 3. A condição cíclica permite que qualquer ponto possa ser visto como o centro e assim é possível fixar um ponto marcado em $(0, 0)$ e outro marcado em (x_0, y_0) , dando especial importância à posição relativa entre os marcados.

A dinâmica ocorre no espaço com base $\{|i, j\rangle, (i, j) \in \{0, 1\}^2\} \otimes \{|x, y\rangle, (x, y) \in \{0, 1, \dots, \sqrt{N}-1\}^2\}$, onde o primeiro espaço representa a moeda com a primeira coordenada indicando a direção e a segunda o sentido de movimento. O segundo espaço é formado pelos nós da malha. A evolução neste grafo se dá pelo operador de evolução

$$U = S(G \otimes I), \quad (3.42)$$

onde

$$S |i, j\rangle |x, y\rangle = |1-i, 1-j\rangle |x + (-1)^i, y + (-1)^j\rangle \quad (3.43)$$

e G é a moeda de Grover

$$G = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Note que o operador S , de dimensão $4N$ utiliza o estado no espaço da moeda para definir para qual nó vizinho deve levar o estado no espaço de nós, sempre respeitando as

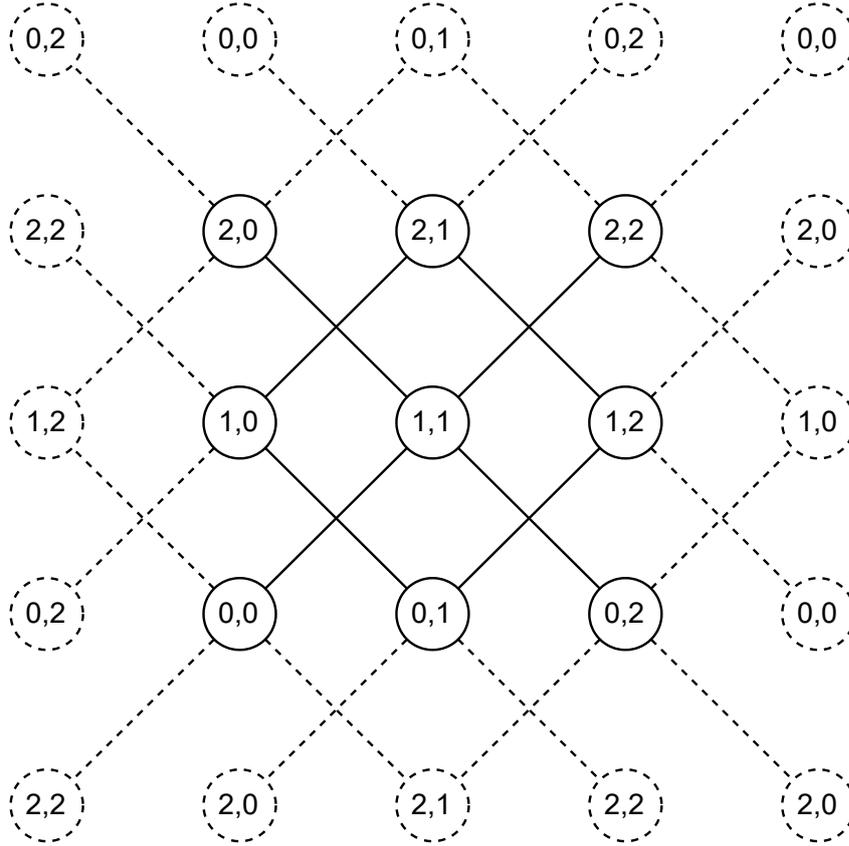


Figura 3 – Exemplo de malha bidimensional com $\sqrt{N} = 3$. As arestas pontilhadas indicam a condição de contorno cíclica.

adjacências do grafo. Já o operador G garante que a moeda seja distribuída entre todas as possibilidades em cada passo. A decomposição espectral da matriz de adjacência aqui não é suficiente pois sozinhos os dois operadores não codificam a ação de A e juntos atuam em um espaço maior do que o espaço de nós.

Define-se $|d_c\rangle$ como a superposição uniforme de todos os elementos da base no espaço da moeda e $|d_p\rangle$ a superposição dos elementos da base de posições da malha. Assim, os elementos a serem marcados considerando o espaço da moeda são

$$|0'\rangle = |d_c\rangle |0, 0\rangle \text{ e } |1'\rangle = |d_c\rangle |x_0, y_0\rangle. \quad (3.45)$$

Ainda, a condição inicial é definida por $|\Psi_0\rangle = |d_c\rangle |d_p\rangle$, que é um autovetor de autovalor 1 de U .

Seguindo a definição de R proposta no início do capítulo, define-se

$$U' = U(I - 2|0'\rangle\langle 0'| - 2|1'\rangle\langle 1'|) = UR \quad (3.46)$$

Para dar início às contas do método proposto, é essencial apresentar uma base ortonormal de autovetores da matriz U . Esta base está descrita em (PORTUGAL, 2018b) e, considerando a dinâmica a partir de uma condição inicial, precisamos apenas considerar

os elementos da base que não sejam ortogonais à ela. Estes são os $e^{\pm i\theta_{kl}}$ -autovetores dados por $|v_{kl}^{\pm\theta_{kl}}\rangle | \tilde{k}, \tilde{l} \rangle$, onde:

$$\cos \theta_{kl} = \frac{1}{2} \left(\cos \frac{2\pi k}{\sqrt{N}} + \cos \frac{2\pi l}{\sqrt{N}} \right), \quad (3.47)$$

$$|\tilde{k}, \tilde{l}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x,y=0}^{\sqrt{N}-1} \omega^{xk+yl} |x, y\rangle, \quad (3.48)$$

$$|v_{kl}^{\pm\theta_{kl}}\rangle = \frac{\pm i}{2\sqrt{2} \sin \theta_{kl}} \left(e^{\mp i\theta_{kl}} - \omega^k, e^{\mp i\theta_{kl}} - \omega^{-k}, e^{\mp i\theta_{kl}} - \omega^l, e^{\mp i\theta_{kl}} - \omega^{-l} \right)^T, \quad (3.49)$$

com $\omega = e^{\frac{2\pi i}{\sqrt{N}}}$ e $(k, l) \neq (0, 0)$.

Em posse dessa decomposição espectral, é possível calcular as quantidades A, B, C, D e E descritas anteriormente para um caso geral. O fato de termos uma matrix U real implica que os autovalores vem em pares conjugados, nos garantindo $B = D = 0$. Resulta também dos cálculos que $A = 0$, nos dando assintoticamente:

$$\lambda = \pm \sqrt{\frac{-C}{E}} = \begin{cases} \pm \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{cN \ln N}}, & \text{se } (x_0, y_0) = (1, 0) \\ \pm \frac{2}{\sqrt{cN \ln N}}, & \text{se } (x_0, y_0) = (\sqrt{N}/2, \sqrt{N}/2) \end{cases}, \quad (3.50)$$

onde a constante c respeita $\frac{2}{\pi^2} \leq c \leq 1$ e é definida pela equação

$$\sum_{\substack{k,\ell=0 \\ (k,\ell) \neq (0,0)}}^{\sqrt{N}-1} \frac{1}{1 - \cos \theta_{k\ell}} = cN \ln N + O(N). \quad (3.51)$$

O valor positivo da Equação (3.50) é associado ao autovalor $e^{i\lambda}$ e o negativo ao autovalor $e^{i\lambda'}$. Relembremos que sendo U uma matriz real os autovalores e autovetores vem conjugados. Logo, a análise segue com o valor positivo e o negativo é completamente análogo, gerando valores que se diferem por uma conjugação complexa em alguns pontos.

Os dois pontos (x_0, y_0) considerados na Equação (3.50) representam dois casos extremos de distância relativas entre marcados: sabendo que um marcado é fixo em $(0, 0)$, os marcados são vizinhos se $(x_0, y_0) = (1, 0)$ e estão o mais distante possível se $(x_0, y_0) = (\sqrt{N}/2, \sqrt{N}/2)$ (recorde que a malha possui condição de fronteira cíclica, logo $(0, 0)$ e $(\sqrt{N} - 1, \sqrt{N} - 1)$ são quase vizinhos). Uma hipótese é que o comportamento de pares marcados que tenham uma distância relativa intermediária esteja limitada por esses dois comportamentos extremos.

A partir deste ponto, toda a análise deve ser dividida nos dois casos considerados. Novamente, vale destacar que todas as igualdades declaradas são assintóticas em relação a N quando mesmo quando não especificados os termos restantes na notação *big-O*.

Para $(x_0, y_0) = (1, 0)$, o primeiro passo é encontrar o 0-autovetor de Λ^λ e ajustá-lo com o valor α . Deste modo, obtém-se a sobreposição de $|\lambda\rangle$ e os elementos marcados

$$\langle 0'|\lambda\rangle = \langle 1'|\lambda\rangle = \frac{1}{4\sqrt{c}\sqrt{\ln N}}. \quad (3.52)$$

Em seguida, a sobreposição de $|\lambda\rangle$ e $|\Psi_0\rangle$:

$$\langle \lambda|\Psi_0\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} + O\left(\frac{1}{\sqrt{N \ln N}}\right), \quad (3.53)$$

que indica que assintoticamente os autovetores $|\lambda\rangle$ e $|\lambda'\rangle$ são os únicos que influenciam na ação do operador nesta condição inicial, visto que a soma das sobreposições a quadrado tende à 1. Então, $|\epsilon_m|$ de fato tende à zero.

Deste modo, substituindo os valores encontrados na Equação (3.5) sabendo que $\lambda = -\lambda'$ e $|\lambda\rangle = |\lambda'\rangle^*$, concluí-se que

$$p(t) = \frac{1}{4c \ln N} \sin^2\left(\frac{\sqrt{2}t}{\sqrt{c}\sqrt{N \ln N}}\right). \quad (3.54)$$

O resultado acima gera duas informações importantes a respeito da dinâmica da busca. Como a função é assintoticamente uma senoide ao quadrado, é trivial encontrar o primeiro tempo onde a função assume um valor máximo e também o seu valor, dados por

$$t_{opt}^{near} = \frac{\pi\sqrt{c}\sqrt{N \ln N}}{2\sqrt{2}} \text{ e } p_{succ}^{near} = \frac{1}{4c \ln N}. \quad (3.55)$$

O mesmo processo de cálculo pode ser repetido para $(x_0, y_0) = (N/2, N/2)$ (N par), gerando os valores análogos

$$t_{opt}^{far} = \frac{\pi\sqrt{c}\sqrt{N \ln N}}{2} \text{ e } p_{succ}^{far} = \frac{1}{2c \ln N}. \quad (3.56)$$

Concluí-se que os marcados distantes são encontrados mais rapidamente e com uma probabilidade de sucesso maior, enquanto a proximidade entre os marcados torna a busca mais demorada e menos precisa. Embora as contas gerem aproximações assintóticas, é possível conferir numericamente com malhas suficientemente grandes. Para os testes, consideramos uma malha 40×40 .

Inicialmente, nota-se que os valores t_{opt} e p_{succ} foram calculados removendo vários termos assintóticos mesmo após desprezar a influência dos demais autovetores. Para conferir esta aproximação, a Figura 4 mostra as curvas analíticas de probabilidade obtidas considerando a influência apenas dos dois autovetores principais de U' . Os pontos destacados são as previsões analíticas. A previsão é menos precisa quando os marcados estão próximos, o que pode ser justificado pelo fato dos termos assintóticos descartados decrescerem mais lentamente neste caso.

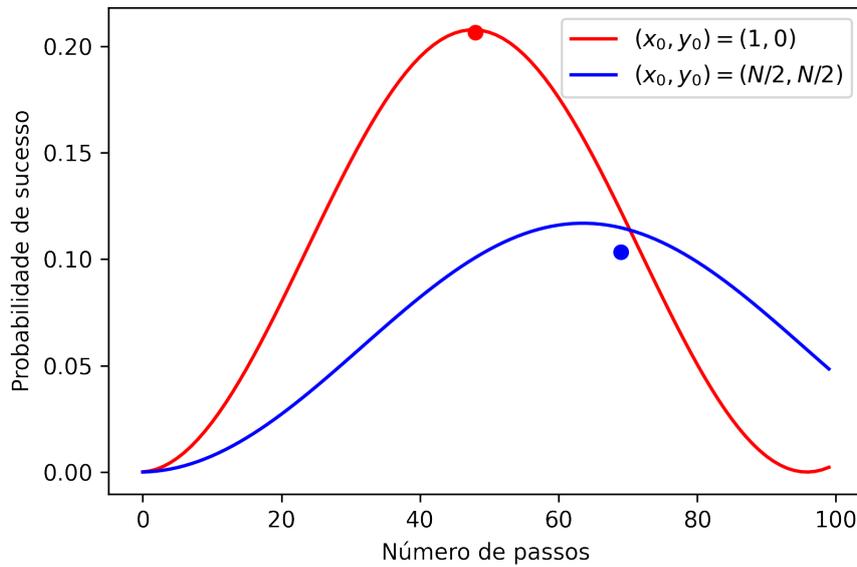


Figura 4 – Curvas de probabilidade de sucesso obtidas considerando apenas os dois autovetores de autovalores mais próximos de 1 (que não são 1) pela Equação (3.5). Pontos indicados são as previsões assintóticas.

A partir desta análise notamos que é possível prever o tempo ótimo e a probabilidade de sucesso sem necessariamente obter os autovetores principais (o que seria custoso para matrizes muito grandes, mesmo sendo apenas dois autovetores). Resta saber se as curvas com todos os autovetores de fato representam comportamentos intermediários entre as duas analíticas propostas. Para isso, foram executadas simulações de passeios quânticos em diferentes posições para o segundo marcado, com o primeiro fixo em $(0, 0)$. Observa-se na Figura 5 que os comportamentos observados estão entre as duas curvas analíticas, embora a previsão para $(x_0, y_0) = (1, 0)$ não seja tão precisa quanto no caso onde $(x_0, y_0) = (N/2, N/2)$, justificado pela presença da interferência dos demais autovetores que ainda não decaíram suficientemente.

3.3 Conclusões parciais

O método desenvolvido neste capítulo se mostrou promissor para permitir a obtenção de resultados analíticos a respeito do tempo ótimo e probabilidade de sucesso de um passeio quântico a tempo discreto, o que implica diretamente no termo dominante da complexidade do algoritmo de busca.

Vale notar que o método não se limita ao exemplo estudado. No mesmo trabalho já publicado (BEZERRA; LUGÃO; PORTUGAL, 2021) vemos também um exemplo de aplicação no hipercubo. O trabalho também sugere a possibilidade de aumentar a análise para múltiplos marcados a partir de conjecturas geradas pela análise dos dois marcados

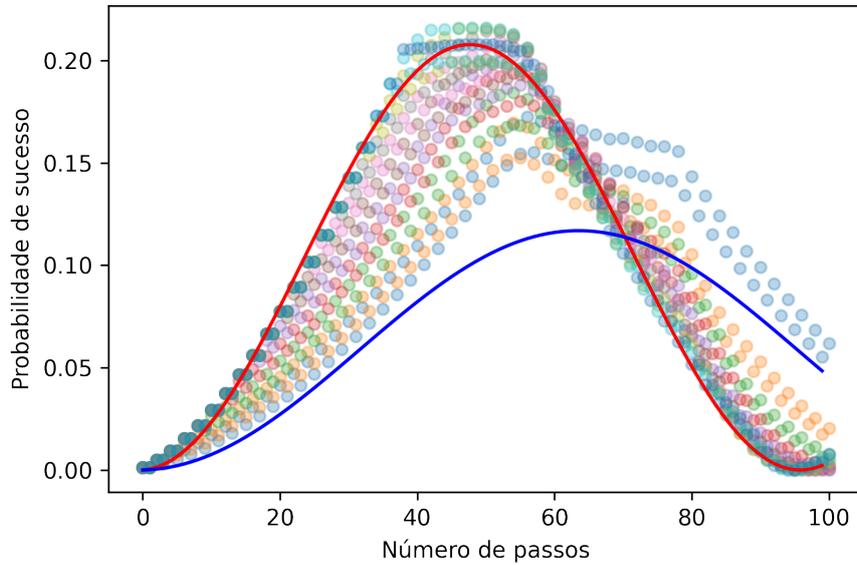


Figura 5 – Curvas de probabilidade de sucesso analíticas representadas por linhas contínuas conforme descritas na Figura 4 e resultados de várias simulações com marcados a diferentes distâncias relativas representados como pontos.

ou considerando configurações específicas de modo que a Equação (3.19) seja tratável analiticamente.

Embora passeios quânticos a tempo discretos tenham sido amplamente estudados na literatura e um algoritmo de busca ótimo para grafos genéricos tenha sido apresentado em (AMBAINIS et al., 2019), é justificável buscar o entendimento a respeito do termo dominante da complexidade exato em um grafo e modelo específico, principalmente para ver como a posição dos marcados e a sua quantidade pode influenciá-lo, além de apenas ter certeza que ele resolve a busca em $\tilde{O}(\sqrt{HT})$ passos, onde HT é o tempo ótimo clássico.

4 Passeios quânticos a tempo contínuo com múltiplos elementos marcados

Neste capítulo apresentaremos uma análise assintótica para passeios quânticos a tempo contínuo com um exemplo em grafos de Johnson, como visto no trabalho submetido (LUGÃO et al., 2022).

Analogamente ao capítulo anterior, aqui detalharemos e usaremos o seguinte resultado:

Dado um grafo $G(V, E)$ com matriz de adjacência A , consideramos o operador de evolução já modificado dado por $U = e^{-iH}$ aplicado ao estado inicial $|\Psi_0\rangle$, onde H é o hamiltoniano gerado pela matriz de adjacência perturbada

$$H = -\gamma A - \sum_{w \in W} |w\rangle \langle w|, \quad (4.1)$$

Sejam λ^+ e λ^- os dois menores autovalores de H . Se a dinâmica ocorrer assintoticamente apenas no plano gerado por $\{|\lambda^+\rangle, |\lambda^-\rangle\}$, a probabilidade de encontrar um marcado pode ser descrita aproximadamente por

$$p(t) \approx \sum_{m \in M} |e^{i\lambda^+ t} \langle m|\lambda^+\rangle \langle \lambda^+|\Psi_0\rangle + e^{i\lambda^- t} \langle m|\lambda^-\rangle \langle \lambda^-|\Psi_0\rangle|^2. \quad (4.2)$$

Ainda, se $\lambda^\pm = -\gamma\phi_0 \pm \epsilon + o(\epsilon)$ e $\langle \lambda^+|\psi(0)\rangle \langle w|\lambda^+\rangle = -\langle \lambda^-|\psi(0)\rangle \langle w|\lambda^-\rangle$, temos:

$$p(t) \approx 4 \left| \langle \lambda^+|\psi(0)\rangle \right|^2 \sum_{w \in W} \left| \langle w|\lambda^+\rangle \right|^2 \sin^2 \epsilon t, \quad (4.3)$$

de onde são diretamente extraídos $t_{opt} = \pi/(2\epsilon)$ e $p_{succ} = 4 \left| \langle \lambda^+|\psi(0)\rangle \right|^2 \sum_{w \in W} \left| \langle w|\lambda^+\rangle \right|^2$.

4.1 Análise assintótica

Sejam $\phi_0 > \phi_1 > \dots > \phi_k$ os autovalores de A . Considere P_l o projetor ortogonal que projeta no autoespaço associado ao autovalor ϕ_l . Sendo assim, a matriz A pode ser decomposta por $A = \sum_{l=0}^k \phi_l P_l$.

Buscamos os autovalores λ de H com autovetores representados por $|\lambda\rangle$ (ou seja, $H|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$). Usando a definição de H e desenvolvendo ambos os lados da equação seguinte, temos:

$$P_l H |\lambda\rangle = -P_l \left(\gamma A + \sum_{w \in W} |w\rangle \langle w| \right) |\lambda\rangle, \quad (4.4)$$

$$\lambda P_l |\lambda\rangle = -\gamma \phi_l P_l |\lambda\rangle - \sum_{w \in W} \langle w|\lambda\rangle P_l |w\rangle, \quad (4.5)$$

$$P_l |\lambda\rangle = -\frac{1}{\lambda + \gamma \phi_l} \sum_{w \in W} \langle w|\lambda\rangle P_l |w\rangle. \quad (4.6)$$

Sendo H uma matriz hermitiana, sabemos que os projetores podem ser decompostos como uma base ortonormal dos autoespaços e se completam para definir uma base ortonormal do domínio de A . Sendo assim, $\sum_{l=0}^k P_l = I$ e, utilizando a Equação (4.6), é possível desenvolver a seguinte expressão considerando um vértice marcado qualquer:

$$\langle w|\lambda\rangle = \sum_{l=0}^k \langle w| P_l |\lambda\rangle \quad (4.7)$$

$$= -\sum_{l=0}^k \frac{1}{\lambda + \gamma \phi_l} \left(\sum_{w' \in W} \langle w'|\lambda\rangle \langle w| P_l |w'\rangle \right). \quad (4.8)$$

Ao isolar os termos de modo a igualar a zero, temos que cada equação representa uma coordenada do produto de uma matriz Λ^λ por um vetor cujas coordenadas são $\langle w|\lambda\rangle |_{w \in W}$:

$$\sum_{w' \in W} \Lambda_{ww'}^\lambda \langle w'|\lambda\rangle = 0, \quad (4.9)$$

onde

$$\Lambda_{ww'}^\lambda = \delta_{ww'} + \sum_{l=0}^k \frac{\langle w| P_l |w'\rangle}{\lambda + \gamma \phi_l}. \quad (4.10)$$

Deste modo, análogo ao método anteriormente explicado, concluímos que os autovalores λ podem ser escolhidos de modo que $\det(\Lambda^\lambda) = 0$, visto que a matriz possui um 0-autovetor, de onde também são tiradas as quantidades $\langle w|\lambda\rangle |_{w \in W}$ com o mesmo tratamento descrito anteriormente utilizando um fator de correção α real.

Notamos que, diferente do método anterior, neste caso λ não tende à 0. Enquanto isso poderia representar um problema para se realizar as contas assintoticamente, isto é resolvido considerando uma nova hipótese que se mostrou verdadeira para muitos casos estudados. Consideramos ainda que as contas permanecem dependente apenas de dois autovalores λ^\pm de H . Entretanto, eles são vistos em função do maior autovalor de A :

$$\lambda^\pm = -\gamma \phi_0 \pm \epsilon + o(\epsilon). \quad (4.11)$$

Esta hipótese se baseia no fato da dinâmica de H se aproximar de $-\gamma A$ na medida que o número de nós perturbados se torna menor (uma vez fixos) em relação ao número de nós N do grafo (que cresce).

Substituindo a Equação (4.11) em (4.10), obtemos a expressão assintótica até a primeira ordem em ϵ

$$\Lambda_{ww'}^\lambda = \pm \frac{\langle w|P_0|w'\rangle}{\epsilon} + \delta_{ww'} - \frac{1}{\gamma} \sum_{l=1}^k \frac{\langle w|P_l|w'\rangle}{\phi_0 - \phi_l} \mp \frac{\epsilon}{\gamma^2} \sum_{l=1}^k \frac{\langle w|P_l|w'\rangle}{(\phi_0 - \phi_l)^2}. \quad (4.12)$$

Usando que $\det(\Lambda^\lambda) = 0$, é possível desenvolver uma expressão da forma $\epsilon^2 + a(\gamma)\epsilon - b(\gamma) = O(\epsilon^3)$. Desta expressão é possível extrair uma equação quadrática com termo linear nulo escolhendo γ tal que $a(\gamma) = 0$ para que se tenha valores simétricos $\epsilon = \pm \sqrt{b(\gamma)}$ assintoticamente.

A partir deste ponto, podemos calcular todas as quantidades em

$$p(t) = \sum_{w \in W} \left| \sum_{\lambda} e^{-i\lambda t} \langle w|\lambda\rangle \langle \lambda|\psi(0)\rangle \right| \quad (4.13)$$

considerando apenas os dois autovalores λ^\pm hipotetizados como os mais importantes. Ressaltamos que $\langle \lambda|\psi(0)\rangle$ pode ser calculado a partir da Equação (4.6) tomando $|\psi(0)\rangle$ como a sobreposição dos 0-autovetores de A .

Vamos observar o que ocorre quando, além de assumirmos a Equação (4.11), também temos que assintoticamente

$$\langle \lambda^+|\psi(0)\rangle \langle w|\lambda^+\rangle = - \langle \lambda^-|\psi(0)\rangle \langle w|\lambda^-\rangle \quad (4.14)$$

para todos $w \in W$, que será também verdadeiro no caso estudado. A partir daí, teremos também que

$$p(t) = 4 \left| \langle \lambda^+|\psi(0)\rangle \right|^2 \sum_{w \in W} \left| \langle w|\lambda^+\rangle \right|^2 \sin^2 \epsilon t. \quad (4.15)$$

Assim, o tempo ótimo se resume a

$$t_{\text{run}} = \frac{\pi}{2\epsilon} \quad (4.16)$$

e a probabilidade de sucesso aproximada é

$$p_{\text{succ}} = 4 \left| \langle \lambda^+|\psi(0)\rangle \right|^2 \sum_{w \in W} \left| \langle w|\lambda^+\rangle \right|^2. \quad (4.17)$$

Vale notar que embora as hipóteses pareçam muito fortes para obtermos Eq. (4.15), existem outros exemplos na literatura na análise para 1 marcado onde isso se verifica (CHILDS; GOLDSTONE, 2004; TANAKA; SABRI; PORTUGAL, 2021; WONG; TARRATACA; NAHIMOV, 2016).

Vamos dar um foco um pouco maior ao cálculo de $|\langle w|\lambda\rangle|$ com o seu fator de correção α . Após encontrarmos $|u\rangle$, um 0-autovetor da matriz Λ^λ , observamos que

$$\langle w|\lambda\rangle\Big|_{w\in W} = \alpha|u\rangle,$$

onde α a princípio é um número complexo. Usando que

$$\sum_{\ell=0}^k \|P_\ell|\lambda^+\rangle\|^2 = 1,$$

$\langle w|\lambda\rangle = \alpha u(w)$ ($u(w)$ é a coordenada de $|u\rangle$ associada a w) e a Equação (4.6), obtemos

$$\frac{1}{|\alpha|^2} = \sum_{\ell=0}^k \frac{1}{|\lambda^+ + \gamma\phi_\ell|^2} \left\| \sum_{w\in W} u(w)P_\ell|w\rangle \right\|^2.$$

Mesmo que dessa forma obtenhamos $|\alpha|$ e não o número complexo α , podemos sem perda de generalidade reescalar $|\lambda\rangle$ com uma unidade complexa $e^{i\theta}$ de modo que $\alpha e^{-i\theta}$ seja um número real positivo.

Novamente as contas se tornam mais tratáveis quando consideramos apenas dois marcados, $W = \{|w_0\rangle, |w_1\rangle\}$ e são o foco da próxima seção para o caso de grafos de Johnson.

4.2 Grafos de Johnson

Como exemplo da aplicação do método, o passeio contínuo no grafo de Johnson é explorado em (LUGÃO et al., 2022). Considere um grafo de Johnson $J(n, k) = G(V, E)$ com o conjunto de nós V dado pelo conjunto dos k -subconjuntos de $[n] = \{1, 2, \dots, n\}$ (totalizando $N = \binom{n}{k}$ nós) e o conjunto de arestas E incluindo todos os pares de conjuntos (v, v') tais que $|v \cap v'| = k - 1$. Um exemplo de um $J(4, 2)$ pode ser visto na Figura 6.

Esta classe de grafos é amplamente estudada na literatura (BANNAI et al., 2021; DAM; KOOLEN; TANAKA, 2014; BROUWER; HAEMERS, 2012a) e a decomposição espectral de sua matriz de adjacência A é conhecida. Tomando um n qualquer e fixado um k , $J(n, k)$ possui $k + 1$ autovalores distintos dados por

$$\phi_l = (k - l)(n - k - l) - l, \quad (4.18)$$

com multiplicidade $\binom{n}{l} - \binom{n}{l-1}$ (convencionando que $\binom{n}{-1} = 0$). Os projetores P_l também possuem expressões conhecidas. Sua diagonal é constante dada por

$$\|P_l|w\rangle\|^2 = \frac{\binom{n}{l} - \binom{n}{l-1}}{\binom{n}{k}} \quad (4.19)$$

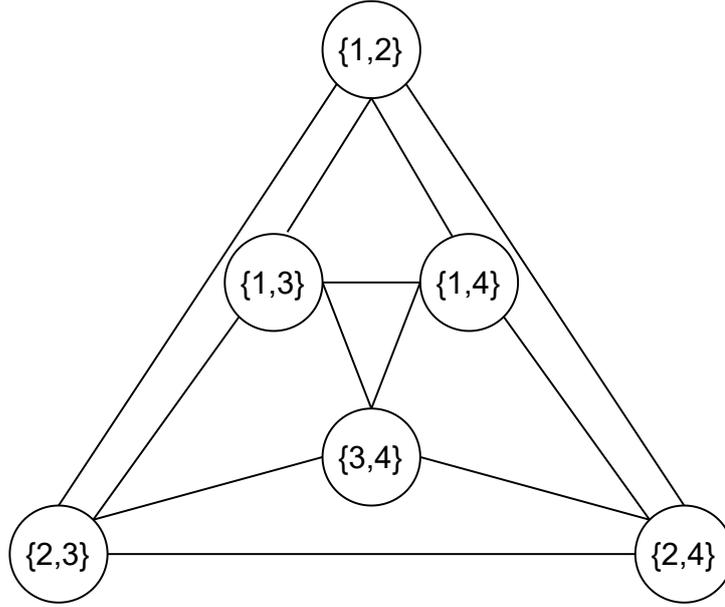


Figura 6 – Exemplo de grafo de Johnson com $n = 4$ e $k = 2$, onde os nós representam k -subconjuntos de $[n]$.

para qualquer $w \in V$, e os termos fora da diagonal são expressos por

$$\langle w | P_l | w' \rangle = \|P_l | w \rangle\|^2 {}_3F_2 \left(\begin{matrix} -\ell, -\delta, \ell - n - 1 \\ k - n, -k \end{matrix} \middle| 1 \right) \quad (4.20)$$

com $w, w' \in V$, onde ${}_3F_2$ é uma função hipergeométrica e $\delta = k - |w \cup w'|$.

Para prosseguir, considere o conjunto de dois marcados $W = \{w, w'\}$, de onde se fixa um único valor de δ e as expressões acima precisam ser calculadas apenas em função deste par de nós. Deste modo, o 4 somatórios que podem aparecer nos cálculos de $\Lambda_{ww'}^\lambda$ vistos na Equação (4.12) serão nomeadas e simplificadas pelas expressões assintóticas:

$$S_1 = \sum_{l=1}^k \frac{\langle w | P_l | w \rangle}{\phi_0 - \phi_l} = \frac{1}{kn} + O\left(\frac{1}{n^2}\right), \quad (4.21)$$

$$S_2 = \sum_{l=1}^k \frac{\langle w | P_l | w' \rangle}{\phi_0 - \phi_l} = O\left(\frac{1}{n^{\delta+1}}\right), \quad (4.22)$$

$$S'_1 = \sum_{l=1}^k \frac{\langle w | P_l | w \rangle}{(\phi_0 - \phi_l)^2} = \frac{1}{k^2 n^2} + O\left(\frac{1}{n^3}\right), \quad (4.23)$$

$$S'_2 = \sum_{l=1}^k \frac{\langle w | P_l | w' \rangle}{(\phi_0 - \phi_l)^2} = O\left(\frac{1}{n^{\delta+2}}\right) \quad (4.24)$$

Utilizando essas expressões no determinante e seguindo o método descrito, obtemos

$$\gamma = S_1 + S'_1 = \frac{1}{kn} + O\left(\frac{1}{n^2}\right), \quad (4.25)$$

$$\epsilon = \frac{\sqrt{2}\gamma}{\sqrt{N(S_2 + S'_2)}} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{N}}(1 + o(1)). \quad (4.26)$$

A partir destas quantidades calculamos a sobreposição entre os marcados e os autovetores $|\lambda^\pm\rangle$ e, daí, obtemos também a sobreposição $\langle\psi(0)|\lambda^\pm\rangle$:

$$\langle w|\lambda\rangle = \frac{1}{2} + o(1) \quad (4.27)$$

$$\langle\psi(0)|\lambda\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} + o(1). \quad (4.28)$$

Por fim, substituindo nas equações (4.16) e (4.17), obtemos

$$t_{opt} = \frac{\pi\sqrt{N}}{2\sqrt{2}}, \quad (4.29)$$

$$p_{succ} = 1 + o(1). \quad (4.30)$$

Concluimos então que há um ganho quadrático no número de passos em relação a uma busca clássica $O(N)$. Notamos que, diferente do caso discreto com a malha estudado anteriormente, não há dependência na localização dos marcados. A dependência na distância entre marcados codificada em δ só aparece nos termos não dominantes.

Na Figura 7 é apresentada uma validação numérica do método para alguns valores de k em $J(15, k)$ com dois marcados arbitrários. Resta ainda entender como o método se comporta com outros grafos mas, como foi visto, é necessário um bom entendimento da decomposição espectral do grafo utilizado e um extenso trabalho de cálculo para aplicá-lo realmente. Estudos numéricos prévios podem ajudar a entender se as hipóteses valem antes de começar a aplicar o método para obter uma complexidade analítica.

4.3 Conclusões parciais

O método estabelecido neste capítulo nos fornece uma forma de calcular a complexidade computacional de um algoritmo de busca por passeios quânticos a tempo contínuo, estendendo o método apresentado no capítulo anterior. As hipóteses necessárias para o funcionamento do método são similares às dos métodos no capítulo anterior. Assintoticamente a dinâmica deve depender apenas de dois autovetores do Hamiltoniano, o que pode ser checado computacionalmente ou até mesmo verificado a partir do funcionamento das previsões analíticas para o tempo ótimo e probabilidade de sucesso.

Como exemplo de um uso com sucesso de nosso método, apresentamos a análise da busca quântica a tempo contínuo em um grafo de Johnson qualquer $J(n, k)$ com dois vértices marcados. Além de exemplificar o funcionamento do método, também obtemos resultados novos a respeito deste grafo que possui aplicações em problemas combinatórios, por exemplo no problema de distinção de elementos. Diferente do caso discreto com malha bidimensional, no caso estudado percebemos que não há dependência no termo dominante

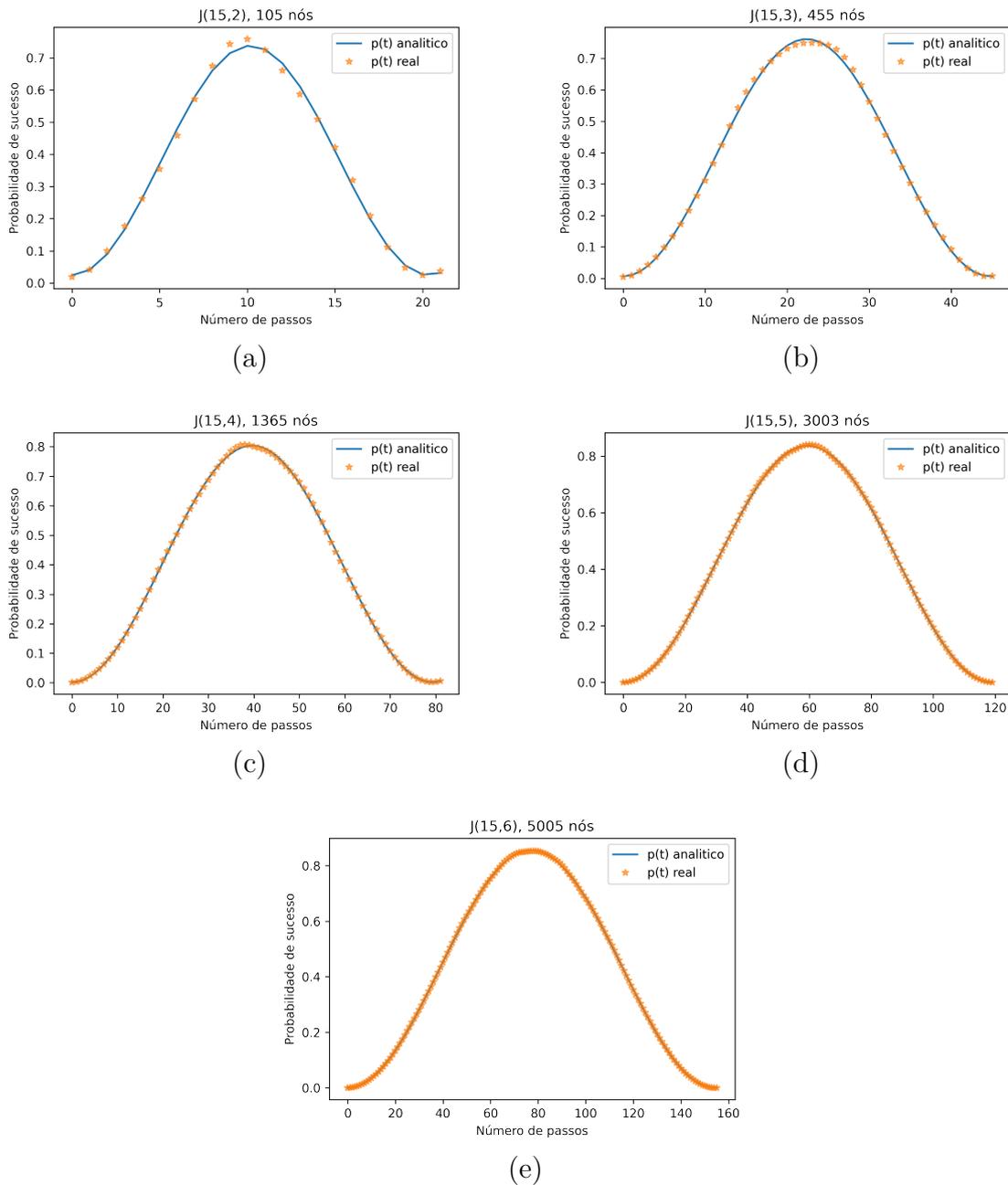


Figura 7 – Comparação entre curva real de probabilidade ao longo do último de passos e previsão analítica utilizando apenas os autovalores de interesse. O eixo x em cada gráfico vai de 0 até $2t_{opt}(N)$, indicando que o máximo de fato é atingido próximo do tempo previsto.

da complexidade em relação à posição dos vértices marcados. Assim, temos resultados gerais independente de que dois vértices marcados foram escolhidos.

Vale notar apenas que se quisermos considerar os termos não dominantes para a escolha de γ (que seria justificável para uma maior precisão) precisamos da distância entre os marcados codificada no parâmetro δ . Caso isso seja desconhecido, podemos reapplicar a busca para os k valores diferentes possíveis para δ e assim o tempo ótimo deve ser multiplicado por k . Como k é fixo, a complexidade permanece $O(\sqrt{N})$, podendo chegar

até o termo dominante exato $\pi k\sqrt{N}/(2\sqrt{2})$ com probabilidade de sucesso $1 + o(1)$.

5 Busca quântica em t -designs com passeios contínuos

O objetivo principal deste capítulo é determinar a complexidade de algoritmos de busca quânticos a tempo contínuo na classe de grafos geradas por t -designs com múltiplos nós marcados, desenvolvido para um trabalho submetido e disponível (LUGÃO; PORTUGAL, 2023). A motivação para este esforço é entender melhor a classe de grafos bipartidos, que de um modo geral se apresentaria como um problema muito mais desafiador. Tomando um subconjunto da classe de grafos bipartidos temos mais chances de conseguir produzir resultados visto que o método apresentado no capítulo anterior faz uso da decomposição espectral da matriz de adjacência por meio de alguma formulação algébrica. Com o uso de t -designs somos capazes de determinar esta decomposição espectral em casos particulares e com isso determinar a complexidade de busca em um subconjunto considerável de grafos bipartidos, mais especificamente grafos bipartidos regulares com determinadas propriedades.

O primeiro passo será determinar a decomposição espectral desse conjunto de t -designs, assim como definir formalmente este objeto matemático. Em seguida, estudaremos diferentes configurações de marcados até obter casos mais gerais do que no capítulo anterior com um número de marcados qualquer.

5.1 Decomposição espectral de t -designs simétricos

Começamos pela definição de t -design (COLBOURNE; DINITZ, 2007; STINSON, 2004):

Definição 5.1 (t -design). Dado um conjunto X de v pontos, um t -design B é uma família de k -subconjuntos de X com $|B| = b$, denominados blocos, tal que cada ponto pertence a exatamente r blocos e quaisquer t pontos distintos estão contidos simultaneamente em λ_t blocos. —

Esta definição depende de 5 parâmetros diferentes, expostos na Tabela 1. Vale notar a existência de algumas identidades que relacionam estes parâmetros, que podem ser obtidas através de uma análise combinatorial.

Obtemos a primeira relação contando o número de pares $(x, s) \in X \times B$ tal que $x \in s$. Esta conta pode ser feita contando o número de pontos (v) e multiplicando pelo número de blocos que os contém (r) ou contando o número de blocos (b) e multiplicando pelo número de pontos contidos neles (k). Isso nos garante a relação $vr = bk$.

A próxima relação se dá fixando um $x \in X$ e tomando os pares $(y, s) \in X \times B$ tal que x e y estão em s simultaneamente. Podemos contar primeiro as possibilidades para y ($v - 1$) e multiplicar pelas número de blocos que contém o par (λ_2) . Outra opção é contar o número de blocos que contém x (r) e multiplicar pelo número de pontos diferentes de x em cada bloco ($k - 1$). Isso nos dá a equação $\lambda_2(v - 1) = r(k - 1)$.

v	número de pontos em X
b	número de blocos em B
r	número de blocos contendo um ponto dado
k	número de pontos em um bloco
λ_t	número de blocos contendo quaisquer t pontos distintos

Tabela 1 – Parâmetros de um t -design

Qualquer t -(v, b, r, k, λ_t)-design é também um s -(v, b, r, k, λ_s)-design para qualquer s que satisfaça $1 \leq s \leq t$. Inclusive, vale a expressão:

$$\lambda_s = \lambda_t \binom{v-s}{t-s} \binom{k-s}{t-s}^{-1}.$$

Segue então que todo t -design com $t \geq 2$ é também um 2-design e admite um valor para λ_2 . Um 2-design é também chamado de *block design*.

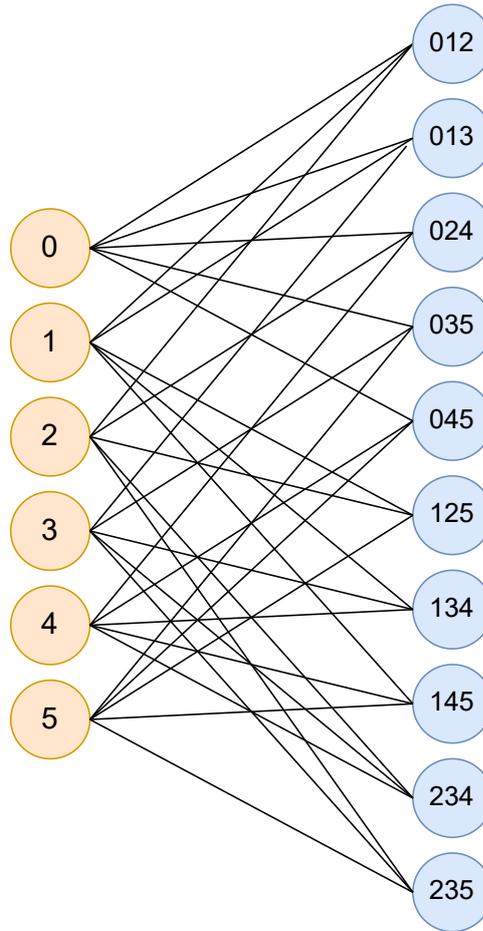
Como exemplo, tomemos um 2-design com $v = 6$ pontos, $b = 10$ blocos, cada bloco com $k = 3$ pontos. Cada ponto está exatamente em $r = 5$ blocos e cada par de pontos está simultaneamente em $\lambda_2 = 2$ blocos. Tomando $X = \{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$, os blocos podem ser dados por

$$\{012\}, \{013\}, \{024\}, \{035\}, \{045\}, \{125\}, \{134\}, \{145\}, \{234\}, \{235\}.$$

Podemos ainda definir uma matriz de incidência N tal que $(N)_{ij} = 1$ se o item i pertence ao j -ésimo bloco e $(N)_{ij} = 0$ caso contrário:

$$N = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Podemos definir o grafo de incidência do 2-design tomando uma parte representando os pontos e outra parte representando os blocos. Conectamos dois nós pela relação de inclusão de um ponto em um bloco, gerando o grafo na Figura 8.


 Figura 8 – Grafo de incidência G de um 2-design.

Seja agora \mathcal{D} um t -design qualquer com parâmetros (v, b, r, k, λ_t) e G o seu grafo de incidência. Por definição, G é um grafo bipartido (r, k) -birregular. Sua matriz de adjacência é dada por

$$A = \begin{pmatrix} 0 & N \\ N^T & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

onde N é uma matriz de incidência $v \times b$. Estabelecemos como resultado principal dessa seção a decomposição espectral de A para o caso $v = b$, onde temos um t -design simétrico.

Teorema 1. *Seja \mathcal{D} um t -design simétrico ($v = b$ e $r = k$). Então, os autovalores da matriz de adjacência de \mathcal{D} são $\{\pm k, \pm\sqrt{r - \lambda_2}\}$ e os projetores referentes a cada autoespaço são*

$$E_{-k} = \frac{1}{2v} \begin{pmatrix} J & -J \\ -J & J \end{pmatrix}, \quad E_k = \frac{1}{2v} \begin{pmatrix} J & J \\ J & J \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

$$E_{-\sqrt{r-\lambda_2}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} I - \frac{1}{v}J & -M \\ -M^T & I - \frac{1}{v}J \end{pmatrix}, \quad E_{\sqrt{r-\lambda_2}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} I - \frac{1}{v}J & M \\ M^T & I - \frac{1}{v}J \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

onde $M = \frac{1}{v\sqrt{r-\lambda_2}}(-kJ + vN)$ e J é uma matriz onde todos as suas coordenadas são iguais a 1. —

Demonstração. Basta mostrarmos que $\{E_k, E_{-k}, E_{\sqrt{r-\lambda_2}}, E_{-\sqrt{r-\lambda_2}}\}$ é um conjunto de projetores ortogonais que satisfazem a relação de completude $\sum_i E_i = I$ e a matriz de adjacência A pode ser decomposta pela equação

$$A = kE_k + (-k)E_{-k} + \sqrt{r-\lambda_2}E_{\sqrt{r-\lambda_2}} + (-\sqrt{r-\lambda_2})E_{-\sqrt{r-\lambda_2}}. \quad (5.4)$$

Vamos primeiro estabelecer algumas igualdades. Primeiramente, temos

$$\begin{aligned} J^2 &= vJ, \\ (I - J/v)^2 &= (I - J/v). \end{aligned}$$

Como N a N^T indica as conexões entre $v = b$ blocos e pontos de um design simétrico, existem exatamente $r = k$ 1's em cada linha e coluna. Logo

$$JN = NJ = N^T J = JN^T = kJ.$$

A partir das equações acima e usando a definição de M obtemos

$$JM = MJ = M^T J = JM^T = 0.$$

Por fim, usamos que a identidade vista em (COLBOURNE; DINITZ, 2007)

$$N^T N = NN^T = (r - \lambda_2)(I - J/v) + k^2 J/v$$

para obter

$$MM^T = M^T M = I - J/v.$$

Agora, podemos provar os pontos exigidos. As matrizes $E_{\pm k}$ and $E_{\pm\sqrt{r-\lambda_2}}$ são

projetores pois

$$\begin{aligned}
 E_{-k}^2 &= \frac{1}{4v^2} \begin{pmatrix} 2J^2 & -2J^2 \\ -2J^2 & 2J^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2v} \begin{pmatrix} J & -J \\ -J & J \end{pmatrix}, \\
 E_k^2 &= \frac{1}{4v^2} \begin{pmatrix} 2J^2 & 2J^2 \\ 2J^2 & 2J^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2v} \begin{pmatrix} J & J \\ J & J \end{pmatrix}, \\
 E_{-\sqrt{r-\lambda_2}}^2 &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (I - \frac{1}{v}J)^2 + MM^T & -(I - \frac{1}{v}J)M - M(I - \frac{1}{v}J) \\ -M^T(I - \frac{1}{v}J) - (I - \frac{1}{v}J)M^T & M^TM + (I - \frac{1}{v}J)^2 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} I - \frac{1}{v}J & -M \\ -M^T & I - \frac{1}{v}J \end{pmatrix}, \\
 E_{\sqrt{r-\lambda_2}}^2 &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (I - \frac{1}{v}J)^2 + MM^T & (I - \frac{1}{v}J)M + M(I - \frac{1}{v}J) \\ M^T(I - \frac{1}{v}J) + (I - \frac{1}{v}J)M^T & M^TM + (I - \frac{1}{v}J)^2 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} I - \frac{1}{v}J & M \\ M^T & I - \frac{1}{v}J \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Checamos agora a ortogonalidade entre esses projetores usando as identidades já vistas e $J(I - J/v) = 0$. De fato,

$$\begin{aligned}
 E_{-k}E_k &= \frac{1}{4v^2} \begin{pmatrix} J^2 - J^2 & J^2 - J^2 \\ -J^2 + J^2 & -J^2 + J^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 E_{-k}E_{-\sqrt{r-\lambda_2}} &= \frac{1}{4v} \begin{pmatrix} J(I - J/v) + JM^T & -JM - J(I - J/v) \\ -J(I - J/v) - JM^T & JM + J(I - J/v) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 E_{-\sqrt{r-\lambda_2}}E_{\sqrt{r-\lambda_2}} &= \frac{1}{2v} \begin{pmatrix} (I - J/v)^2 - MM^T & (I - J/v)M - M(I - J/v) \\ -M^T(I - J/v) + (I - J/v)M^T & -M^TM + (I - J/v)^2 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

As outras 9 combinações são análogas e recaem em cálculos similares a um dos 3 casos expostos acima.

A relação de completude é obtida somando as matrizes em bloco e notando que os blocos fora da diagonal se cancelam e a soma na diagonal nos dá $J/v + I - J/v = I$.

Finalmente, checamos a Equação (5.4), que nos mostra que esse conjunto de autovalores com seus respectivos projetores ortogonais formam uma decomposição espectral de A

$$\begin{aligned}
 & kE_k + (-k)E_{-k} + \sqrt{r - \lambda_2}E_{\sqrt{r - \lambda_2}} + (-\sqrt{r - \lambda_2})E_{-\sqrt{r - \lambda_2}} = \\
 &= \frac{k}{2v} \begin{pmatrix} J & J \\ J & J \end{pmatrix} - \frac{k}{2v} \begin{pmatrix} J & -J \\ -J & J \end{pmatrix} \\
 &+ \frac{\sqrt{r - \lambda_2}}{2} \begin{pmatrix} I - \frac{1}{v}J & M \\ M^T & I - \frac{1}{v}J \end{pmatrix} - \frac{\sqrt{r - \lambda_2}}{2} \begin{pmatrix} I - \frac{1}{v}J & -M \\ -M^T & I - \frac{1}{v}J \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & kJ/v + \sqrt{r - \lambda_2}M \\ kJ/v + \sqrt{r - \lambda_2}M^T & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & kJ/v - kJ/v + N \\ kJ/v - kJ/v + N^T & 0 \end{pmatrix} = A,
 \end{aligned}$$

o que conclui a demonstração. \square

5.2 Busca em t -designs

Vamos determinar a complexidade de uma busca quântica a partir de um passeio quântico a tempo contínuo em um t -design simétrico. Para dar início à análise, consideramos um único marcado.

5.2.1 Único vértice marcado

Assumindo que o t -design é simétrico e contém apenas um elemento marcado $|0\rangle$, consideramos $\{\phi_l\}_{l=0}^3$ a lista de seus autovalores ordenados de forma decrescente.

Usando uma simplificação para 1 marcado das equações expostas na Capítulo 4, também descrita em (CHAKRABORTY; NOVO; ROLAND, 2020; CHAN et al., 2022; SILVA; POSNER; PORTUGAL, 2023; LUGÃO et al., 2022), calculamos as somas

$$\begin{aligned}
 S_1 &= \sum_{l=1}^3 \frac{\|E_{\phi_l} |0\rangle\|^2}{\phi_0 - \phi_l}, \\
 S_2 &= \sum_{l=1}^3 \frac{\|E_{\phi_l} |0\rangle\|^2}{(\phi_0 - \phi_l)^2},
 \end{aligned}$$

que são iguais a

$$S_1 = \frac{v-1}{v} \frac{k}{k^2 - r + \lambda_2} + \frac{1}{4vk}$$

e

$$S_2 = \frac{v-1}{v} \frac{(k^2 + r - \lambda_2)}{(k^2 - r + \lambda_2)^2} + \frac{1}{8vk^2}.$$

Tomamos o operador de evolução e^{-iHt} onde $H = -\gamma A - |0\rangle\langle 0|$. O valor ótimo para γ e o seu tempo de parada ótimo correspondente são dados pelas expressões

$$\begin{aligned} \gamma &= S_1, \\ t_{\text{opt}} &= \frac{\pi}{2\epsilon}, \end{aligned}$$

onde $\epsilon = \frac{S_1 \|E_k |0\rangle\|}{\sqrt{S_2}}$. Usando que $\lambda_2 = r(k-1)/(v-1)$ e $k = r$, obtemos

$$t_{\text{opt}} = \frac{\pi\sqrt{k+1}}{\sqrt{2k}}\sqrt{v} + O\left(\frac{1}{\sqrt{v}}\right).$$

Considerando que o número total de vértices, n , é igual a $v + b = 2v$, concluímos que o tempo ótimo t_{opt} é da ordem de \sqrt{n} . Para completar a análise de complexidade precisamos da probabilidade de sucesso, dada por

$$p_{\text{succ}} = \frac{S_1^2}{2vS_2 \|E_k |0\rangle\|^2} = \frac{k}{k+1} + O\left(\frac{1}{v}\right).$$

Note que, se o grafo bipartido é completo, temos $k = v$. Isso resulta em $p_{\text{succ}} = 1 + O(1/v)$ e $t_{\text{opt}} = \pi\sqrt{v}/\sqrt{2} + O(1/\sqrt{v})$. Esses resultados para um grafo bipartido completo eram esperados e foram descritos em (PORTUGAL; MOQADAM, 2022).

Note que o Teorema 1 não se aplica a grafos bipartidos completos pois há uma indeterminação em M quando $\lambda_2 = r$, que é o caso em um grafo completo visto que todo par de pontos está contido em todos os blocos. Entretanto, é interessante notar que o comportamento assintótico se alinha com a teoria de grafos bipartidos completos. O resultado não necessariamente seguirá para os casos com mais marcados.

5.2.2 Múltiplos vértices marcados

Definimos W como o conjunto de vértices marcados. Seguindo a metodologia apresentada no Capítulo 4, nosso interesse está em apenas dois autovalores do Hamiltoniano, dados por

$$\lambda^\pm = -\gamma\phi_0 \pm \epsilon. \quad (5.5)$$

Como vimos, a extensão para vários marcados implica que, para encontrarmos os autovalores, precisamos resolver a equação

$$\det(\Lambda_\lambda) = 0, \quad (5.6)$$

onde Λ_λ é uma matriz $|W| \times |W|$ definida por

$$(\Lambda_\lambda)_{ww'} = \delta_{ww'} + \sum_{l=0}^3 \frac{\langle w | E_{\phi_l} | w' \rangle}{\lambda + \gamma \phi_l}. \quad (5.7)$$

Combinando as equações (5.7) e (5.5), chegamos na expressão de $\Lambda_{\lambda(\epsilon)}$, denotada por Λ_ϵ :

$$(\Lambda_\epsilon)_{ww'} = \pm \frac{\langle w | E_k | w' \rangle}{\epsilon} + \delta_{ww'} - \frac{S_{ww'}^{(1)}}{\gamma} \mp \frac{\epsilon S_{ww'}^{(2)}}{\gamma^2} + O(\epsilon^2), \quad (5.8)$$

onde

$$S_{ww'}^{(1)} = \sum_{l=1}^3 \frac{\langle w | E_{\phi_l} | w' \rangle}{k - \phi_l} \quad (5.9)$$

e

$$S_{ww'}^{(2)} = \sum_{l=1}^3 \frac{\langle w | E_{\phi_l} | w' \rangle}{(k - \phi_l)^2}. \quad (5.10)$$

Apesar dessa modificação na matriz, a Equação (5.6) permanece desafiadora em um caso geral. Deste modo, vamos começar analisando as configurações possíveis para dois marcados e depois discutir como generalizar para casos com um número qualquer de marcados.

Dois vértices marcados

No caso de dois vértices marcados, temos que Λ_λ é uma matriz 2×2 , cujo determinante é facilmente calculado. Vale notar que as coordenadas da matriz $(\Lambda_\lambda)_{ww'}$ nos casos onde $w \neq w'$ dependem da relação entre os marcados, visto que são determinados pelos valores de $S_{ww'}^{(1)}$ e $S_{ww'}^{(2)}$, que dependem dos projetores calculados no Teorema 1. Sendo assim, temos que considerar as três relações diferentes possíveis entre os marcados tomando V e V' como as partes do grafo bipartido:

Caso 1: w e w' adjacentes

Neste cenário temos $w \in V$ e $w' \in V'$, em diferentes partes e adjacentes. Daí, temos que

$$S_{ww'}^{(1)} = \frac{-k + v}{v(k^2 - r + \lambda_2)} - \frac{1}{4vk},$$

$$S_{ww'}^{(2)} = \frac{2k(-k + v)}{v(k^2 - r + \lambda_2)^2} - \frac{1}{8vk^2}.$$

Observando que Λ_λ é uma matriz simétrica, calculamos

$$\det(\Lambda_\lambda) = \left((\Lambda_\lambda)_{ww} + (\Lambda_\lambda)_{ww'} \right) \left((\Lambda_\lambda)_{ww} - (\Lambda_\lambda)_{ww'} \right).$$

O termo $(\Lambda_\lambda)_{ww} + (\Lambda_\lambda)_{ww'}$ é o autovalor de Λ_λ associado ao autovetor uniforme. Os valores corretos para λ^\pm são obtidos igualando esse termo à zero. Seleccionamos então ϵ de forma que

$$\begin{aligned} 0 &= \epsilon \left((\Lambda_\epsilon)_{ww} + (\Lambda_\epsilon)_{ww'} \right) \\ &= a(\gamma) + b(\gamma)\epsilon + c(\gamma)\epsilon^2 + O(\epsilon^3), \end{aligned}$$

com γ escolhido de modo que $b(\gamma) = 0$, nos fornecendo duas raízes simétricas. Essa abordagem nos dá

$$\gamma = \frac{2k - v - kv}{v(r - k^2 - \lambda_2)} \quad (5.11)$$

e

$$\epsilon^\pm = \pm \frac{k+1}{\sqrt{k(k+3)}} \frac{1}{\sqrt{v}} + O\left(\frac{1}{v}\right). \quad (5.12)$$

Aplicando as fórmulas obtidas em (LUGÃO et al., 2022) e as igualdades $\lambda_2 = r(k-1)/(v-1)$ e $r = k$, obtemos

$$t_{\text{opt}} = \frac{\pi\sqrt{k(k+3)}}{2(k+1)}\sqrt{v} + O\left(\frac{1}{v}\right)$$

e

$$p_{\text{succ}} = \frac{(k+1)^2}{k(k+3)} + O\left(\frac{1}{\sqrt{v}}\right).$$

Caso 2: w e w' não são adjacentes e estão em partes diferentes

Nesse cenário, obtemos

$$\begin{aligned} S_{ww'}^{(1)} &= \frac{-k}{v(k^2 - r + \lambda_2)} - \frac{1}{4vk}, \\ S_{ww'}^{(2)} &= \frac{-2k^2}{v(k^2 - r + \lambda_2)^2} - \frac{1}{8vk^2}. \end{aligned}$$

Obtemos uma pequena diferença no valor de γ

$$\gamma = \frac{2k - kv}{v(r - k^2 - \lambda_2)} \quad (5.13)$$

e um ϵ mais simples

$$\epsilon^\pm = \pm \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{k+1}} \frac{1}{\sqrt{v}} + O\left(\frac{1}{v}\right). \quad (5.14)$$

Com essas novas expressões, obtemos

$$t_{\text{opt}} = \frac{\pi\sqrt{k+1}}{2\sqrt{k}}\sqrt{v} + O\left(\frac{1}{\sqrt{v}}\right)$$

e

$$p_{\text{succ}} = \frac{k}{k+1} - O\left(\frac{1}{\sqrt{v}}\right).$$

Caso 3: w e w' estão na mesma parte

Esse é o caso mais simples ($\{w, w'\} \in V$ or $\{w, w'\} \in V'$), visto que as somas são

$$\begin{aligned} S_{ww'}^{(1)} &= -\frac{k}{v(k^2 - r + \lambda_2)} + \frac{1}{4vk}, \\ S_{ww'}^{(2)} &= -\frac{k^2 + r - \lambda_2}{v(k^2 - r + \lambda_2)^2} + \frac{1}{8vk^2}. \end{aligned}$$

A partir delas, obtemos

$$\gamma = \frac{2k^2v - 3k^2 + \lambda_2 - r}{2kv(k^2 + \lambda_2 - r)} \quad (5.15)$$

e

$$\epsilon^\pm = \pm \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{k+1}} \frac{1}{\sqrt{v}} + O\left(\frac{1}{v}\right), \quad (5.16)$$

que coincide no termo dominante com o caso 2. Logo, as expressões para o tempo ótimo e probabilidade de sucesso são

$$t_{\text{opt}} = \frac{\pi\sqrt{k+1}}{2\sqrt{k}}\sqrt{v} + O\left(\frac{1}{\sqrt{v}}\right)$$

e

$$p_{\text{succ}} = \frac{k}{k+1} - O\left(\frac{1}{\sqrt{v}}\right).$$

Múltiplos vértices marcados na mesma parte

Para generalizar esta análise, restringimos nossa atenção ao caso onde existem m vértices marcados em uma das partes do grafo bipartido. Esta é a única configuração possível onde todos os vértices distintos se relacionam da mesma forma (dadas as três relações descritas na subseção anterior) quando $m > 2$ e isso nos garante uma matriz que possui um determinante analítico facilmente calculável.

Vamos nos aproveitar do fato que $(\Lambda_\lambda)_{ww'}$ possui o mesmo valor para todo par (w, w') (com $w \neq w'$) dado que estão todos na mesma parte. Além disso, como nos casos anteriores, $(\Lambda_\lambda)_{ww}$ é a mesma expressão independente de quem é w . Dessa forma, obtemos uma matriz $m \times m$ Λ_λ da forma

$$\begin{pmatrix} a & b & \dots & b \\ b & a & \dots & b \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b & b & \dots & a \end{pmatrix},$$

cujos determinantes são $(a-b)^{m-1}(a+(m-1)b)$. Isso pode ser checado notando que $(1, 1, \dots, 1)$ é um autovetor de autovalor $(a+(m-1)b)$ e que $\dim(\ker(\Lambda_\lambda - I(a-b))) = m-1$, nos indicando a existência de um autoespaço de autovalor $(a-b)$ de dimensão $m-1$.

Recordamos que $a = (\Lambda_\lambda)_{ww}$ e $b = (\Lambda_\lambda)_{ww'}$, com $w \neq w'$. Nosso objetivo é achar uma raiz para o determinante, então podemos tomar λ como a raiz de $(a - b)$ ou de $(a + (m - 1)b)$. Se tomarmos λ raiz de $(a - b)$ não obtemos uma expressão que se assemelha à (5.5). Sendo assim, limitamos nossa busca a um λ descrito pela Equação (5.5) que seja raiz de $(a + (m - 1)b)$. Corrigindo um ϵ no denominador, lidamos com a expressão

$$\epsilon((\Lambda_\epsilon)_{ww} + (m - 1)(\Lambda_\epsilon)_{ww'}) = A(\gamma)\epsilon^2 + B(\gamma)\epsilon + C(\gamma) + O(\epsilon^3).$$

Deste modo, seguimos como antes e encontramos γ tal que $B(\gamma) = 0$ e ϵ^\pm a partir da expressão quadrática resultante.

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{-3k^2m + 4k^2v + \lambda_2m - mr}{4kv(k^2 + \lambda_2 - r)}, \\ \epsilon^\pm &= \pm \frac{\sqrt{k}\sqrt{m}}{\sqrt{2v}\sqrt{k+1}} + O\left(\frac{1}{v}\right). \end{aligned}$$

As expressões para t_{opt} e p_{succ} seguem também do desenvolvimento realizado no Capítulo 4. Entretanto, como o capítulo e o trabalho originado por ele em (LUGÃO et al., 2022) foca primariamente no caso de dois marcados, neste caso teremos que elaborar as expressões com mais detalhes. Começamos partindo da função de probabilidade no tempo dada por

$$p(t) = 4|\langle \lambda | \psi(0) \rangle|^2 \sum_{w \in W} |\langle w | \lambda \rangle|^2 \sin^2 \epsilon t + o(1) + o(\epsilon t), \quad (5.17)$$

que implica em $t_{\text{opt}} = \frac{\pi}{2\epsilon}$, independente do número de marcados. Isso nos dá que

$$t_{\text{opt}} = \frac{\pi\sqrt{k+1}}{\sqrt{2k}\sqrt{m}}\sqrt{v} + O\left(\frac{1}{\sqrt{v}}\right). \quad (5.18)$$

Já a probabilidade de sucesso vem da expressão

$$p_{\text{succ}} = 4|\langle \lambda | \psi(0) \rangle|^2 \sum_{w \in W} |\langle w | \lambda \rangle|^2. \quad (5.19)$$

Neste caso, as contas diferem um pouco do caso com dois marcados. Primeiro, precisamos encontrar cada $|\langle w | \lambda \rangle|$, notando que pela definição de Λ_λ temos que o autovetor com $|\langle w | \lambda \rangle|$ nas suas coordenadas é um autovetor de autovalor 0. Baseado na nossa escolha de ϵ , temos que $u = (1, 1, \dots, 1)$ é um autovetor de autovalor 0. Assim, o autovetor que estamos procurando é múltiplo da distribuição uniforme, o que nos dá $|\langle w | \lambda \rangle| = |\langle w' | \lambda \rangle|$ para todo par (w, w') . Precisamos apenas encontrar um fator de correção c , descrito em (LUGÃO et

al., 2022) da forma:

$$\begin{aligned}
 1/|c|^2 &= \sum_{l=0}^3 \frac{1}{|\lambda + \gamma\phi_l|^2} \left\| \sum_{w \in W} u(w) E_{\phi_l} |w\rangle \right\|^2 \\
 &= \sum_{l=0}^3 \frac{1}{|\lambda + \gamma\phi_l|^2} \left\| \sum_{w \in W} E_{\phi_l} |w\rangle \right\|^2 \\
 &= \frac{m^2 \left(\frac{1}{(\epsilon - 2\gamma k)^2} + \frac{1}{\epsilon^2} \right)}{2v} \\
 &\quad + \left(-\frac{m^2}{2v} + \frac{m}{2} \right) \left(\frac{1}{(\epsilon + \gamma(-k + \sqrt{-\lambda_2 + r}))^2} + \frac{1}{(\epsilon + \gamma(-k - \sqrt{-\lambda_2 + r}))^2} \right),
 \end{aligned}$$

o que resulta em

$$\langle w|\lambda\rangle = c = \frac{k}{\sqrt{2}\sqrt{m}\sqrt{k^2 - \lambda_2 + r}} + \left(\frac{1}{\sqrt{v}} \right).$$

Conhecendo esse termo, também conseguimos calcular

$$\begin{aligned}
 \langle \psi(0)|\lambda\rangle &= -\frac{1}{\lambda + \gamma\phi_0} \sum_{w \in W} \langle w|\lambda\rangle \langle \psi_0|w\rangle \\
 &= -\frac{mc}{\epsilon\sqrt{2v}} \\
 &= -\frac{\sqrt{2}}{2} + o(1).
 \end{aligned}$$

Substituindo as expressões na Equação (5.19) obtemos

$$p_{\text{succ}} = \frac{k}{k+1} + O\left(\frac{1}{\sqrt{v}}\right). \quad (5.20)$$

Múltiplos vértices marcados em partes opostas

Outra configuração de marcados onde encontramos uma forma de seguir com as contas é o cenário onde o subgrafo induzido pelos marcados é regular com partes de mesmo tamanho. Embora o determinante completo ainda seja um desafio, neste caso podemos fazer uso do fato que a soma de todas as linhas de Λ_λ é a mesma. Desse modo, notamos que o vetor uniforme é um autovetor de autovalor correspondente à soma das linhas e encontramos λ que zera esse autovalor, o que consequentemente zera o determinante da matriz.

Seja m o número de vértices marcados em cada parte do grafo bipartido (totalizando $2m$ marcados) e n o número de vértices marcados aos quais cada vértice marcado está conectado (portanto, o grau do subgrafo induzido). Adicionalmente, definimos a como $(\Lambda_\lambda)_{ww'}$ quando w e w' são adjacentes, b quando estão em diferentes partes e não são adjacentes, e c quando estão na mesma parte, esgotando as relações possíveis entre dois marcados quaisquer. Deste modo, a soma de cada linha em Λ_λ será igual a

$$(\Lambda_\lambda)_{ww} + na + (m - n)b + (m - 1)c.$$

Esta expressão é também autovalor de $(1, 1, \dots, 1)$. Para zerar a expressão, multiplicamos a mesma por ϵ e obtemos uma expressão semelhante à Equação (5.2.2), permitindo que escolhamos um γ que cancele o termo linear e nos dê valores simétricos de ϵ^\pm . Assim, obtemos

$$\begin{aligned}\gamma &= \frac{-2km + kv + nv}{v(k^2 + \lambda_2 - r)}, \\ \epsilon^\pm &= \pm \frac{\sqrt{m}(k+n)}{\sqrt{k(k+2n+1)}\sqrt{v}} + O\left(\frac{1}{v}\right).\end{aligned}$$

A partir disso, finalmente chegamos em

$$t_{\text{opt}} = \frac{\pi\sqrt{k(k+2n+1)}}{2\sqrt{m}(k+n)}\sqrt{v} + O\left(\frac{1}{v}\right). \quad (5.21)$$

Na equação anterior, vale notar que conseguimos recuperar os casos com dois marcados quando temos um vértice em cada parte ($m = 1$) no caso onde são adjacentes ($n = 1$) ou não adjacentes ($n = 0$). Logo, o cenário com dois marcados discutido anteriormente é um subcaso do que estamos vendo agora.

Para calcular a probabilidade de sucesso, realizamos o mesmo procedimento do caso com m marcados na mesma parte notando que $\langle \lambda | w \rangle = c$ pois estamos novamente lidando com o autovetor uniforme. Assim,

$$1/|c|^2 = \frac{-\frac{m^2}{v} + m + \frac{-km(m-n) + mn(-k+v)}{v\sqrt{-\lambda_2+r}}}{\left(\epsilon + \gamma(-k + \sqrt{-\lambda_2+r})\right)^2} + \frac{-\frac{m^2}{v} + m - \frac{-km(m-n) + mn(-k+v)}{v\sqrt{-\lambda_2+r}}}{\left(\epsilon + \gamma(-k - \sqrt{-\lambda_2+r})\right)^2} + \frac{2m^2}{\epsilon^2 v}.$$

Seguindo contas análogas¹ ao caso anterior obtemos

$$p_{\text{succ}} = \frac{(k+n)^2}{k(k+2n+1)} + O\left(\frac{1}{v}\right).$$

5.3 Conclusões parciais

Em todos os casos analisados fica evidente que o termo dominante na probabilidade de sucesso não depende do número de vértices ou sequer do número de marcados. Ainda, se aumentamos o grau k do grafo bipartido regular esse termo se aproxima de 1. Em outros casos, é constante dado um k fixo. Vale notar ainda que no último cenário há também uma dependência de n , o que indica que o grau conectividade dos marcados aumenta a constante do termo dominante da probabilidade.

Dada que a probabilidade de sucesso demonstrou-se $o(1)$, precisamos nos preocupar apenas com o tempo ótimo para determinar a complexidade do algoritmo de busca. Neste caso, embora tenha ficado evidente que o tempo ótimo é $O(\sqrt{v})$, as equações (5.18) e (5.21)

¹ Por serem mais extensos, os cálculos foram assistidos pela biblioteca *sympy*.

indicam como o número de marcados m e sua conectividade n reduzem o tempo de execução do algoritmo. De um modo geral, observamos uma complexidade $O\left(\frac{\sqrt{v}}{\sqrt{m}}\right)$, o que condiz com o algoritmos de Grover com muitos marcados.

Um ponto notável a respeito de t_{opt} na Equação (5.21), que descreve os casos onde cada parte possui m marcados, se dá no seguinte cenário: quando $k > m$, temos a opção de escolher um conjunto de marcados que induz um subgrafo bipartido completo, de modo que $n = m$. Isso implica que cada vértice marcado está conectado a todos os outros marcados na parte oposta. Sob essas condições, temos $t_{\text{opt}} = O\left(\frac{\sqrt{v}}{m}\right)$, desde que m não extrapole um k fixo. Esse comportamento é inesperado e não é comum em buscar quânticas com muitos marcados.

6 Considerações finais

Esta tese apresentou dois métodos novos para a análise de busca em grafos a partir de passeios quânticos, um voltado ao tempo discreto e outro ao tempo contínuo. Independente do grafo ou modelo escolhido o método pode ser aplicado verificando um pequeno conjunto de hipóteses. Sendo assim, qualquer formulação de passeios quânticos descrita na revisão bibliográfica poderia ser um objeto de estudo.

Neste estudo foi de nosso interesse especial os casos onde não é necessário construir uma versão bipartida do grafo como os modelos de Szegedy. Isso justifica-se pois queremos reduzir o tamanho da base computacional e assim reduzir a complexidade espacial. Por mais que já tenha sido visto que essa reformulação seja capaz de produzir buscas eficientes, muitas vezes vale estudar os outros modelos para conferir se há o mesmo ganho.

Neste caso, todos os exemplos estudados garantiram no mínimo um ganho quadrático e conseguimos observar se e como a complexidade varia com a quantidade e localização de marcados. Ainda, obtemos um resultado inesperado no caso do grafo gerado pelo t -design ao mostrarmos uma configuração de marcados cujo tempo ótimo decresce quadraticamente mais rápido com a quantidade de marcados em relação ao comportamento visto em grafos completos, por exemplo.

Vale destacarmos apenas que para todos os resultados obtidos devemos lidar com um número fixo de marcados. Se o número de marcados depende do número de nós, por exemplo, as análises assintóticas não necessariamente valem pois alguma dependência em N pode ter sido perdida ao descartarmos termos.

De todo modo, concluí-se que os métodos analíticos obtidos são ferramentas importantes na análise de busca quântica e podem gerar resultados mais precisos ou até mesmo inesperados ao serem aplicados em modelos e grafos específicos, a partir do momento que conseguimos uma configuração de marcados tratável pelas equações propostas.

Trabalhos futuros podem incluir outros grafos e outros modelos de passeios quânticos, sejam a tempo discreto ou contínuo. O modelo *staggered* proposto por (PORTUGAL et al., 2016), por exemplo, é um bom candidato a tempo discreto. Para o tempo contínuo, pode também ser interessante analisar com mais cuidado o modelo proposto por (APERS et al., 2021) para entender se o aumento na complexidade espacial pode produzir um resultado mais eficiente no termo dominante quando consideramos vários marcados.

Referências

AHARONOV, Y.; DAVIDOVICH, L.; ZAGURY, N. Quantum random walks. *Physical Review A*, v. 48, n. 2, p. 1687–1690, ago. 1993. ISSN 1050-2947, 1094-1622. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.48.1687>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 18.

AMBAINIS, A. Quantum Walk Algorithm for Element Distinctness. *SIAM Journal on Computing*, v. 37, n. 1, p. 210–239, jan. 2007. ISSN 0097-5397. Publisher: Society for Industrial and Applied Mathematics. Disponível em: <<https://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/s0097539705447311>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 23.

AMBAINIS, A. et al. Quadratic speedup for finding marked vertices by quantum walks. *arXiv:1903.07493 [quant-ph]*, mar. 2019. ArXiv: 1903.07493. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1903.07493>>. Citado 4 vezes nas páginas 13, 20, 21 e 34.

APERS, S. et al. *Quadratic speedup for spatial search by continuous-time quantum walk*. arXiv, 2021. ArXiv: 2112.12746. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2112.12746>>. Citado 3 vezes nas páginas 13, 21 e 57.

APERS, S.; SARLETTE, A. Quantum Fast-Forwarding: Markov Chains and Graph Property Testing. *arXiv:1804.02321 [quant-ph]*, jan. 2019. ArXiv: 1804.02321. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1804.02321>>. Citado na página 12.

BANNAI, E. et al. Algebraic combinatorics. In: *Algebraic Combinatorics*. [S.l.]: De Gruyter, 2021. Citado na página 38.

BANNAI, E.; ITO, T. *Algebraic Combinatorics I*. Menlo Park, CA: Benjamin/Cummings, 1984. Citado na página 17.

BEZERRA, G. A.; LUGÃO, P. H. G.; PORTUGAL, R. Quantum walk-based search algorithms with multiple marked vertices. *Physical Review A*, v. 103, n. 6, p. 062202, jun. 2021. ISSN 2469-9926, 2469-9934. ArXiv: 2103.12878. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/2103.12878>>. Citado 4 vezes nas páginas 14, 24, 29 e 33.

BOYER, M. et al. Tight bounds on quantum searching. *Fortschritte der Physik: Progress of Physics*, Wiley Online Library, v. 46, n. 4-5, p. 493–505, 1998. Citado na página 22.

BROUWER, A. E.; HAEMERS, W. H. Distance-regular graphs. In: *Spectra of graphs*. [S.l.]: Springer, 2012. p. 177–185. Citado na página 38.

BROUWER, A. E.; HAEMERS, W. H. *Spectra of Graphs*. New York: Springer, 2012. Citado na página 17.

CHAKRABORTY, S. et al. Optimal quantum spatial search on random temporal networks. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 119, p. 220503, 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.220503>>. Citado na página 13.

- CHAKRABORTY, S.; NOVO, L.; ROLAND, J. Optimality of spatial search via continuous-time quantum walks. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 102, p. 032214, 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.102.032214>>. Citado na página 48.
- CHAN, A. et al. Of shadows and gaps in spatial search. *Quantum Inf. Comput.*, v. 22, n. 13&14, p. 1110–1131, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.26421/QIC22.13-14-2>>. Citado na página 48.
- CHILDS, A. M. Universal computation by quantum walk. *Physical review letters*, APS, v. 102, n. 18, p. 180501, 2009. Citado na página 12.
- CHILDS, A. M.; GOLDSTONE, J. Spatial search by quantum walk. *Physical Review A*, v. 70, n. 2, p. 022314, ago. 2004. ISSN 1050-2947, 1094-1622. ArXiv: quant-ph/0306054. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/quant-ph/0306054>>. Citado 4 vezes nas páginas 12, 13, 20 e 37.
- COLBOURNE, C.; DINITZ, J. *Handbook of combinatorial designs*. [S.l.]: CRC press Boca Raton, FL, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 46.
- DAM, E. R. van; KOOLEN, J. H.; TANAKA, H. Distance-regular graphs. *arXiv preprint arXiv:1410.6294*, 2014. Citado na página 38.
- DANTSIN, E.; KREINOVICH, V.; WOLPERT, A. On quantum versions of record-breaking algorithms for sat. *ACM SIGACT News*, ACM New York, NY, USA, v. 36, n. 4, p. 103–108, 2005. Citado na página 22.
- DHEERAJ, M. N.; BRUN, T. A. Continuous limit of discrete quantum walks. *Phys. Rev. A*, v. 91, p. 062304, 2015. Citado na página 12.
- DIESTEL, R. Graph theory 3rd ed. *Graduate texts in mathematics*, v. 173, p. 33, 2005. Citado na página 17.
- GILLESPIE, D. T. Why quantum mechanics cannot be formulated as a markov process. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 49, p. 1607–1612, Mar 1994. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.49.1607>>. Citado na página 17.
- GROVER, L. K. A fast quantum mechanical algorithm for database search. In: *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*. [S.l.: s.n.], 1996. p. 212–219. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 21.
- LUGÃO, P. H. G.; PORTUGAL, R. *Quantum search by continuous-time quantum walk on t-designs*. 2023. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2310.14141>>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 43.
- LUGÃO, P. H. G. et al. *Multimarked Spatial Search by Continuous-Time Quantum Walk*. arXiv, 2022. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2203.14384>>. Citado 7 vezes nas páginas 14, 35, 38, 48, 51, 53 e 54.
- NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. *Quantum computation and quantum information*. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 2002. Citado na página 15.

- PHILIPP, P.; TARRATACA, L.; BOETTCHER, S. Continuous-time quantum search on balanced trees. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 93, p. 032305, 2016. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.93.032305>>. Citado na página 13.
- PORTILHEIRO, V. Applying grover's algorithm to unique-k-sat. 2018. Citado na página 22.
- PORTUGAL, R. *Quantum Walks and Search Algorithms*. 2nd. ed. Cham: Springer, 2018. Citado 4 vezes nas páginas 13, 17, 23 e 25.
- PORTUGAL, R. *Quantum Walks and Search Algorithms*. [S.l.]: Springer International Publishing, 2018. Citado na página 30.
- PORTUGAL, R.; MOQADAM, J. K. Implementation of continuous-time quantum walks on quantum computers. *ArXiv:2212.08889*, 2022. Citado na página 49.
- PORTUGAL, R.; OLIVEIRA, M. C. de; MOQADAM, J. K. Staggered Quantum Walks with Hamiltonians. *Physical Review A*, v. 95, n. 1, p. 012328, jan. 2017. ISSN 2469-9926, 2469-9934. ArXiv: 1605.02774. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1605.02774>>. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 20.
- PORTUGAL, R. et al. The staggered quantum walk model. *Quantum Information Processing*, v. 15, n. 1, p. 85–101, jan. 2016. ISSN 1570-0755, 1573-1332. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s11128-015-1149-z>>. Citado 4 vezes nas páginas 12, 20, 23 e 57.
- SILVA, C. F. T. d.; POSNER, D.; PORTUGAL, R. Walking on vertices and edges by continuous-time quantum walk. *Quantum Information Processing*, v. 22, n. 2, p. 93, Jan 2023. ISSN 1573-1332. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11128-023-03842-4>>. Citado na página 48.
- STINSON, D. R. *Combinatorial Designs: Constructions and Analysis*. New York: Springer, 2004. ISBN 0387217371 9780387217376 128018938X 9781280189388. Citado na página 43.
- SZEGEDY, M. Quantum Speed-Up of Markov Chain Based Algorithms. In: *45th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*. Rome, Italy: IEEE, 2004. p. 32–41. ISBN 978-0-7695-2228-9. Disponível em: <<http://ieeexplore.ieee.org/document/1366222/>>. Citado 4 vezes nas páginas 9, 12, 19 e 20.
- TANAKA, H.; SABRI, M.; PORTUGAL, R. Spatial Search on Johnson Graphs by Continuous-Time Quantum Walk. *arXiv:2108.01992 [quant-ph]*, ago. 2021. ArXiv: 2108.01992. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/2108.01992>>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 37.
- TREGENNA, B. et al. Controlling discrete quantum walks: coins and initial states. *New J. Phys.*, v. 5, n. 1, p. 83, 2003. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/1367-2630/5/i=1/a=383>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 19.
- WANG, Y. et al. Qudits and high-dimensional quantum computing. *Frontiers in Physics*, Frontiers Media SA, v. 8, p. 589504, 2020. Citado na página 16.

WATROUS, J. Quantum simulations of classical random walks and undirected graph connectivity. *Journal of computer and system sciences*, Elsevier, v. 62, n. 2, p. 376–391, 2001. Citado na página 12.

WONG, T. G.; TARRATACA, L.; NAHIMOV, N. Laplacian versus adjacency matrix in quantum walk search. *Quantum Information Processing*, v. 15, n. 10, p. 4029–4048, 2016. ISSN 1573-1332. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11128-016-1373-1>>. Citado na página 37.