

Laboratório Nacional de Computação Científica

# **Caminhando em vértices e arestas com o passeio quântico contínuo no tempo**

Cauê Francisco Teixeira da Silva

Petrópolis, RJ

2022

Cauê Francisco Teixeira da Silva

**Caminhando em vértices e arestas com o passeio  
quântico contínuo no tempo**

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

Orientador: Renato Portugal

Petrópolis, RJ

2022

Silva, Cauê Francisco Teixeira da.

S586c Caminhando em vértices e arestas com o passeio quântico contínuo no tempo /  
Cauê Francisco Teixeira da Silva, – Petrópolis, RJ: 2022.  
64 f.: il.; 30 cm.  
Referências: f. 59-61.

Tese (Doutorado em Modelagem Computacional)  
Laboratório Nacional de Computação Científica, 2022.  
Orientador: Renato Portugal

1. Computação quântica. 2. Passeio aleatório (Matemática). 3. Teoria dos grafos.  
4. Markov, Processos de. I. Portugal, Renato. II. LNCC/MCTI. III. Título .

CDD – 004.1

## CAUÊ FRANCISCO TEIXEIRA DA SILVA

### CAMINHANDO EM VÉRTICES E ARESTAS COM O PASSEIO QUÂNTICO CONTÍNUO NO TEMPO

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. Franklin de Lima Marquezino, D.Sc

Prof. Marcelo de Oliveira Terra Cunha, D.Sc



Documento assinado eletronicamente por **Franklin de Lima Marquezino (E), Usuário Externo**, em 14/12/2022, às 17:52 (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 **Renato Portugal, Pesquisador Titular**, em 14/12/2022, às 18:04 (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 15/12/2022, às 09:49 (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 **Marcelo de Oliveira Terra Cunha (E), Usuário Externo**, em 15/12/2022, às 10:41 (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 **10636752** e o código CRC **375E81B1**.

---

**Referência:** Processo nº 01209.000097/2020-39

SEI nº 10636752

**Dedicatória**  
*Para minha mãe.*

# Agradecimentos

Nessa vida muita gente passou e marcou minha vida para eu chegar até aqui. Nestes agradecimentos destaco quem marcou os últimos 4 anos. Embora, me sinta grato por todas as pessoas que em algum momento marcaram a minha vida de alguma forma.

Em primeiro lugar, agradeço a minha mãe por tanto amor que me deu. Também por ter me criado de uma forma que eu soubesse valorizar tanta coisa boa que a vida tem para dar.

Ao orientador Rento Portugal agradeço o excelente "time" de saber o momento de cobrar e o momento de ser mais paciente. Vou levar para toda minha vida os conselhos dados ao longo desses 6 anos.

Para as minhas tias do Carmo e Odete agradeço por terem me acolhido com tanto carinho. As tias Ângela e Helena sou grato por terem me ajudado, cada uma da sua forma, ao meu crescimento como pessoa.

Ao meu irmão Raphael pela grande amizade e pela influência artística que tem sobre mim. Ao irmão João Pedro pelos domingos de jogatina e risadas compartilhados.

Ao amigo Leandro por sempre estar disposto a me ajudar nos meus melhores e piores momentos. Ao amigo Aaron pelas conversas sobre os melhores filmes e séries de todos. Ao amigo Felipe pelas conversas que iam do mais "cult" ao mais bobo em questão de segundos.

Aos amigos do grupo de quântica do LNCC Jalil, Gustavo, Pedro, Frank e Bruno por todas as discussões que me fazem entender cada vez mais de computação quântica.

Aos funcionários do LNCC em especial Roberta, Ana Néri e Moreira.

Por fim, agradeço às agências de fomento CAPES e CNPq pelo financiamento que tornaram este trabalho possível.

*"Que alegria cantar porque sei  
que a dor não tem lugar  
permanente no coração de ninguém."  
(Moraes Moreira)*

# Resumo

A dinâmica de passeios quânticos obedece às leis da mecânica quântica com uma restrição extra de localidade, a qual demanda que o operador de evolução seja local, no sentido que o caminhante deve visitar locais vizinhos antes de visitar locais distantes. Normalmente, o Hamiltoniano é obtido das matrizes de adjacência ou laplaciana do grafo e o caminhante pula de um vértice para vértices vizinhos. Neste trabalho, definimos uma versão do passeio quântico a tempo contínuo que permite o caminhante pular de vértice para aresta. Como uma aplicação, analisamos o algoritmo de busca espacial no grafo bipartido completo através de uma modificação na nova versão do Hamiltoniano com um termo extra que depende da localização do vértice marcado ou da aresta marcada, de forma similar ao que é feito no modelo de passeio quântico a tempo contínuo. Nós mostramos que o tempo de execução ótimo para achar ou um vértice, ou uma aresta é  $O(\sqrt{N_e})$  com probabilidade de sucesso  $1 - o(1)$ , onde  $N_e$  é o número de arestas do grafo bipartido completo.

**Palavras-chave:** Computação quântica, passeio aleatório (Matemática), teoria dos grafos, processos de Markov.

# Abstract

The quantum walk dynamics obey the laws of quantum mechanics with an extra locality constraint, which demands that the evolution operator is local in the sense that the walker must visit the neighboring locations before endeavoring to distant places. Usually, the Hamiltonian is obtained from either the adjacency or the laplacian matrix of the graph and the walker hops from vertices to neighboring vertices. In this work, we define a version of the continuous-time quantum walk that allows the walker to hop from vertices to edges and vice versa. As an application, we analyze the spatial search algorithm on the complete bipartite graph by modifying the new version of the Hamiltonian with an extra term that depends on the location of the marked vertex or marked edge, similar to what is done in the standard continuous-time quantum walk model. We show that the optimal running time to find either a vertex or an edge is  $O(\sqrt{N_e})$  with success probability  $1 - o(1)$ , where  $N_e$  is the number of edges of the complete bipartite graph.

**Keywords:** Quantum computing, random walk(Math), graph theory, Markov processes.

# Lista de figuras

Figura 1 – Do lado esquerdo (a) temos um rascunho de como gerar um grafo linha em azul a partir de um grafo raiz em vermelho. Do lado direito (b) temos representada a transformação de um grafo $G$ em seu grafo Linha $L(G)$ . . . . .	20
Figura 2 – $e_{u,v}$ possui $7 = 4 + 5 - 2$ arestas adjacentes. . . . .	20
Figura 3 – A figura (a) representa $T(G)$ por completo. A figura (b) destaca a parte de $T(G)$ que é uma cópia de $G$ . A figura (c) destaca a parte de $T(G)$ que é uma cópia de $L(G)$ . A figura (d) destaca a parte de $T(G)$ que vem das relações de incidência de $G$ entre vértices e arestas. . . . .	21
Figura 4 – $K_{2,2}$ com os rótulos dos vértices e das arestas. . . . .	33
Figura 5 – A curva contínua em azul é $p_v(t)$ para $n = 100$ e os pontos vermelhos são simulações numéricas. . . . .	40
Figura 6 – A curva contínua em azul é $p_e(t)$ para $n = 100$ e os pontos vermelhos são simulações numéricas. . . . .	40
Figura 7 – Os pontos em vermelho são $\epsilon^v$ calculado numericamente e a reta em vermelho é obtida de um fitting com $f(x) \approx -0.49x - 0.055$ . Os x's em preto são $\epsilon^v$ calculado analiticamente com $g(x) = \left(1 - \frac{7}{9n}\right) \frac{1}{\sqrt{N}}$ . . . . .	42
Figura 8 – Os pontos em vermelho são $\epsilon^v$ calculado numericamente e a reta em vermelho é obtida de um fitting com $f(x) \approx -0.49x - 0.079$ . Os x's em preto são $\epsilon^v$ calculado analiticamente com $g(x) = \left(1 - \frac{1}{n}\right) \frac{1}{\sqrt{N}}$ . . . . .	43
Figura 9 – Como $\lambda_v^\pm = -\gamma_v \phi_0 \pm \epsilon^v$ verificamos que $\epsilon^v$ tende para 0. . . . .	43
Figura 10 – Como $\lambda_e^\pm = -\gamma_e \phi_0 \pm \epsilon^e$ verificamos que $\epsilon^e$ tende para 0. . . . .	44
Figura 11 – A figura sugere que assintoticamente os produtos tendem a se igualar. . . . .	44
Figura 12 – A figura sugere que assintoticamente os produtos tendem a se igualar. . . . .	45
Figura 13 – Grafo $G$ e uma total tesselação utilizando 4 cores (polígonos de tamanho 1 não estão representados). . . . .	49
Figura 14 – Grafo $G$ com uma total tesselação e o grafo total $T(G)$ com a respectiva tesselação usual. . . . .	52
Figura 15 – Fitting do desvio padrão em função do tempo para diferentes valores de $\theta$ . . . . .	56
Figura 16 – Coeficiente angular da expressão do desvio padrão calculado de forma numérica em função do tempo. . . . .	57

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>12</b>
<b>2</b>	<b>Introdução ao passeio quântico contínuo no tempo</b>	<b>15</b>
2.1	Cadeias de Markov clássicas contínuas no tempo	15
2.2	Passeio quântico contínuo no tempo usando cadeias de Markov	17
2.2.1	Passeio quântico contínuo no tempo na reta	17
<b>3</b>	<b>Grafo total</b>	<b>19</b>
3.1	Sobre o grafo total de um grafo	19
3.2	Autovalores da matriz de adjacência do grafo total de um grafo regular	22
3.3	Autovetores da matriz de adjacência do grafo total de um grafo regular	24
<b>4</b>	<b>Andando em vértices e arestas de um grafo com o passeio quântico contínuo no tempo</b>	<b>28</b>
4.1	Método para achar a complexidade computacional de algoritmos de busca	29
4.2	Busca quântica com o passeio quântico total no grafo completo	32
4.3	Busca quântica com o passeio quântico total no grafo bipartido completo	33
4.3.1	Verificação numérica das hipóteses	41
<b>5</b>	<b>Andando em vértices e arestas usando o passeio quântico escalonado</b>	<b>46</b>
5.1	Passeio quântico escalonado total	47
5.2	Passeio quântico escalonado total na reta	52
5.2.1	Calculando o desvio padrão numericamente	56
<b>6</b>	<b>Considerações finais</b>	<b>58</b>
6.1	Trabalhos futuros	58
	<b>Referências</b>	<b>60</b>
	<b>Apêndices</b>	<b>63</b>
	<b>APÊNDICE A Revisão de complexidade de tempo</b>	<b>64</b>

# 1 Introdução

Passeios quânticos são a versão quântica de passeios aleatórios (AHARONOV; DAVIDOVICH; ZAGURY, 1993). Como passeios aleatórios são usados em muitas aplicações de algoritmos, é esperado que passeios quânticos sejam utilizados em algoritmos quânticos (PORTUGAL, 2018). De fato, Childs provou que qualquer algoritmo quântico pode ser implementado através de um passeio quântico (CHILDS, 2009). A dinâmica de passeios quânticos obedece às leis da mecânica quântica com uma restrição extra de localidade: se a posição do caminhante é  $x$ , então a posição seguinte  $x'$  deve ser da vizinhança de  $x$ . A evolução do tempo pode ser discreta (AHARONOV et al., 2001) ou contínua (FARHI; GUTMANN, 1998), mas a estrutura espacial deve ser discreta. Na literatura, encontramos muitos tipos de estrutura espacial: (1) o conjunto de vértices no passeio quântico a tempo contínuo (FARHI; GUTMANN, 1998) e no passeio quântico escalonado (PORTUGAL et al., 2016); (2) o conjunto de arcos no passeio quântico com moeda (HIGUCHI et al., 2014); (3) o conjunto de arestas no modelo de Szegedy (SZEGEDY, 2004); (4) triângulos no passeio quântico em complexos simpléticos (MATSUE; OGURISU; SEGAWA, 2016); (5) arestas conectando vértices e faces no passeio quântico em imersões (ZHAN, 2021); entre outros exemplos.

O algoritmo de busca espacial com passeios quânticos contínuos no tempo foram introduzidos por Childs e Goldstone (CHILDS; GOLDSTONE, 2004) depois da bem sucedida definição de busca espacial a tempo discreto em hipercubos (SHENVI; KEMPE; WHALEY, 2003). No caso a tempo contínuo, a evolução no tempo é dada por um Hamiltoniano que é obtido a partir da matriz de adjacência modificada por um termo que depende da localização do vértice marcado. Implementações experimentais de algoritmos de busca com passeio quântico contínuo no tempo são descritos em (DELVECCHIO et al., 2020; WANG et al., 2020; BENEDETTI et al., 2021; QU et al., 2022).

O grafo total  $T(G)$  do grafo  $G$  é definido associando os vértices de  $T(G)$  com vértices e arestas de  $G$ , de tal forma que dois vértices de  $T(G)$  são adjacentes, se e somente se, os correspondentes vértices ou arestas de  $G$  forem adjacentes, ou incidentes. As propriedades do grafo total do grafo bipartido completo foram largamente analisadas (GAO; LUO; LIU, 2012; LI; GU; LEI, 2019; ZHAO; HAO; WEI, 2022). Além disso, o grafo total tem sido aplicado a redes de comunicação e interconexão com o objetivo de alcançar redes mais robustas e tolerante a falhas (LI; GU; LEI, 2019; DÜNDAR; AYTAÇ, 2004). A análise espectral da matriz de adjacência do grafo total de grafos regulares foi estudado em muitos artigos (CVETKOVIĆ, 1973; LIU; WANG, 2021; HAZAMA, 2002; AKBARI et al., 2006).

O modelo de passeios quânticos escalonados foi definido em (PORTUGAL et al.,

2016). Neste modelo é realizado um processo de tesselação, que consiste em uma partição dos vértices do grafo com cada elemento da partição sendo um clique. Com as tesselações em mãos definimos vetores que por sua vez dão origem a operadores locais que definem o operador de evolução. Portugal (PORTUGAL, 2016) analisou uma subclasse importante do passeio quântico escalonado, aqueles que são definidos em grafos 2-tesseláveis. Portugal et al. (PORTUGAL; OLIVEIRA; MOQADAM, 2017) estenderam o modelo através de Hamiltonianos  $e^{i\theta H}$ , onde  $H$  é uma reflexão ortogonal. Portugal et al. (PORTUGAL; FERNANDES, 2017) mostraram que o modelo com Hamiltonianos tem um ganho com relação à versão clássica, o que não ocorre com o primeiro modelo de passeio quântico escalonado. Higuchi et al. (HIGUCHI et al., 2019) encontraram os autovalores e autovetores do operador de evolução do passeio quântico escalonado que utilizam 2 tesselações.

Neste trabalho, nós definimos consistentemente um modelo de passeio quântico a tempo contínuo que permite ao caminhante pular de vértice para aresta e vice-versa. Uma primeira tentativa usando passeios quânticos escalonados se revelou uma tarefa muito difícil (ABREU et al., 2020). Existem muitas formas possíveis do caminhante se locomover, incluindo o caso no qual o caminhante é permitido pular (1) de um vértice para qualquer vértice vizinho e qualquer aresta incidente, e (2) de uma aresta  $e$  para qualquer aresta vizinha e qualquer vértice de  $e$ . Chamaremos tal modelo de passeio quântico total. Outros casos serão discutidos no Capítulo 6. O espaço de Hilbert associado com o grafo  $G$  é gerado não apenas pelos vértices mas também pelas arestas e a dinâmica é determinada pelo Hamiltoniano definido por  $U(t) = \exp(-it\gamma A)$ , onde  $A$  é a matriz de adjacência do grafo total  $T(G)$ . Como uma aplicação, nós analisamos o algoritmo de busca espacial no grafo bipartido completo através do passeio quântico total. Neste modelo, nós estamos interessados não apenas em encontrar um vértice marcado, mas também uma aresta marcada. Nós mostramos que o tempo de execução ótimo de achar tanto um vértice como uma aresta do grafo bipartido completo é  $O(\sqrt{N_e})$  com probabilidade de sucesso  $1 - o(1)$ , onde  $N_e$  é o número de arestas de  $G$ . Esta parte do trabalho deu origem a um artigo pré-print no Arxiv (SILVA; POSNER; PORTUGAL, 2022). Outro modelo que estudamos nesse trabalho foi o passeio quântico escalonado total. Nós fornecemos uma formalização matemática para tal modelo. Também fizemos um estudo numérico para encontrar o desvio padrão desse novo modelo na reta, e como esperado observamos o comportamento balístico da partícula através da dependência linear do desvio padrão em função do tempo. O desvio padrão é importante no contexto de passeios quânticos pois é uma medida de quão rápido a partícula se locomove pelo grafo.

O texto é estruturado da seguinte maneira: no Capítulo 2 nós fazemos uma breve introdução do passeio quântico contínuo no tempo, no Capítulo 3 nós apresentamos o grafo total e analisamos a decomposição espectral da matriz de adjacência do mesmo, no Capítulo 4 definimos o passeio quântico total e aplicamos tal modelo para algoritmos de busca no grafo bipartido completo, no Capítulo 5 formalizamos o passeio quântico

escalonado total e no [Capítulo 6](#) fazemos considerações finais sobre o que foi estudado ao longo do texto e falamos de algumas possibilidades para trabalhos futuros.

## 2 Introdução ao passeio quântico contínuo no tempo

Uma das principais divisões de passeios quânticos são entre os modelos com tempo discreto e com tempo contínuo. Neste capítulo faremos uma breve introdução ao modelo padrão de tempo contínuo.

### 2.1 Cadeias de Markov clássicas contínuas no tempo

De forma geral, a dinâmica de cadeias de Markov se desenvolve em um grafo. A partícula se encontra nos vértices e uma aresta ligando dois vértices indica que eles estão a um passo de distância. Além disso, a partícula se locomove aleatoriamente entre os vértices do grafo. Temos que se uma partícula se encontra em um vértice não temos como saber deterministicamente onde ela estará no instante seguinte. O que podemos saber é a probabilidade da partícula se encontrar em um dado vértice depois de um determinado tempo.

Nas cadeias de Markov clássicas contínuas no tempo uma partícula pode ir de um vértice  $x_j$  para um vértice vizinho  $x_i$  a qualquer instante. Conforme o tempo vai passando a probabilidade de encontrar a partícula no vértice  $x_j$  vai diminuindo. Dessa forma, a probabilidade da partícula ter se locomovido para um vértice adjacente aumenta. Para determinar o quão rápido a partícula se locomove entre os vértices definiremos a taxa de transição  $\gamma$ .

No nosso caso, consideramos que  $\gamma$  é uma constante que não depende do tempo e do vértice. Através da taxa  $\gamma$  é possível controlar o quão rápido a partícula se espalha no grafo. Encontrar  $\gamma$  que não seja pequeno demais nem grande demais é um dos grandes desafios da área, pois se for muito pequeno a partícula demora muito tempo para encontrar vértices distantes. Já se for muito grande a partícula tende a sobreposição uniforme rapidamente, o que não é interessante para a maioria dos algoritmos onde os passeios quânticos são aplicados. A probabilidade de transição de um vértice para um vizinho é dada por um múltiplo da taxa de transição e do tempo.

Seja  $\epsilon$  um tempo infinitesimal então a probabilidade de uma partícula se locomover de  $x_j$  para um vértice vizinho  $x_i$  é dada por  $\epsilon\gamma$ . Seja  $d_j$  o grau do vértice  $x_j$ , ou seja, a quantidade de vizinhos de  $x_j$ . Logo a probabilidade da partícula se encontrar em um vértice adjacente de  $x_j$  após um tempo  $\epsilon$  é dado por  $d_j\gamma\epsilon$ . Desta forma a probabilidade de permanecer parado é dado por  $1 - d_j\gamma\epsilon$ . Como dissemos a localização da partícula é

dada de forma probabilística onde para cada vértice do grafo existe uma probabilidade correspondente. Logo temos uma distribuição de probabilidades que pode ser interpretado como um vetor. Desta forma a dinâmica da cadeia de Markov é descrita utilizando uma matriz de transição  $M(t)$ .

Temos que  $M_{ij}(t)$  é a probabilidade da partícula localizada em  $x_j$  ir para  $x_i$  durante o intervalo de tempo  $t$ . Então

$$M_{ij}(\epsilon) = \begin{cases} 1 - d_j\gamma\epsilon + O(\epsilon^2), & \text{se } i = j, \\ \gamma\epsilon + O(\epsilon^2), & \text{se } i \neq j. \end{cases} \quad (2.1)$$

Com o objetivo de analisar a matriz de transição definiremos a matriz geradora

$$H_{ij}(\epsilon) \begin{cases} 0, & \text{se } i \neq j \text{ e não são adjacentes,} \\ -\gamma, & \text{se } i \neq j \text{ e são adjacentes,} \\ d_j\gamma, & \text{se } i = j. \end{cases} \quad (2.2)$$

Temos que em uma cadeia de Markov o evento em um instante posterior só depende do estado atual, independentemente do que ocorreu anteriormente. Ou seja, o que ocorreu anteriormente não interfere na dinâmica da cadeia. Desta forma como a probabilidade de dois eventos independentes ocorrer é igual ao produto das probabilidades de cada evento ocorrer temos que

$$M_{ij}(t + \epsilon) = \sum_{k=1}^n M_{ik}(t)M_{kj}(\epsilon).$$

Separando do somatório a parcela com  $k = j$  obtemos

$$\begin{aligned} M_{ij}(t + \epsilon) &= M_{ij}(t)M_{jj}(\epsilon) + \sum_{k \neq j} M_{ik}(t)M_{kj}(\epsilon) \\ &= M_{ij}(t)(1 - d_j\gamma\epsilon) - \epsilon \sum_{k \neq j} M_{ik}(t)H_{kj} \\ &= M_{ij}(t)(1 - \epsilon H_{jj}) - \epsilon \sum_{k \neq j} M_{ik}(t)H_{kj} \end{aligned}$$

Logo

$$\frac{M_{ij}(t + \epsilon) - M_{ij}(t)}{\epsilon} = - \sum_k M_{ik}(t)H_{kj}.$$

Realizando o limite de  $\epsilon \rightarrow 0$  obtemos

$$\frac{dM(t)}{dt} = -M(t)H \quad (2.3)$$

Para encontrar a solução para essa equação diferencial, definimos  $R(t) = e^{-Ht} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-Ht)^j}{j!}$ . Logo, usando a expansão de Taylor, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{dR(t)}{dt} &= \left( \sum_{j=0}^{\infty} \frac{j(-Ht)^{j-1}}{j!} \right) (-H) = \left( \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-Ht)^{j-1}}{(j-1)!} \right) (-H) \\ &= \left( \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-Ht)^k}{k!} \right) (-H) = -R(t)H. \end{aligned}$$

Portanto

$$M(t) = e^{-Ht},$$

com  $M_{i,j}(0) = \delta_{i,j}$ .

Finalmente se a distribuição inicial é dada por  $\vec{p}(0)$  temos que a distribuição de probabilidades no instante  $t$  é dada por

$$\vec{p}(t) = M(t)\vec{p}(0).$$

## 2.2 Passeio quântico contínuo no tempo usando cadeias de Markov

Utilizaremos as cadeias de Markov como base para definir os passeios quânticos contínuos no tempo. Através do processo de quantização padrão transformamos a distribuição de probabilidades em um vetor de amplitudes de probabilidade e a matriz de transição em um operador unitário equivalente. Utilizando a mesma notação da seção anterior temos que  $H$  é hermitiano, mas  $M$  não é em geral. Com este propósito trocamos  $H$  por  $iH$ . O operador de evolução é dado por

$$U(t) = e^{-iHt}.$$

Desta forma o estado quântico no instante  $t$  é dado por

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle,$$

onde  $|\psi(0)\rangle$  é o estado inicial e a distribuição de probabilidade é dado por

$$p_k = |\langle k|\psi(t)\rangle|^2,$$

onde  $k$  é o rótulo do vértice  $k$ .

### 2.2.1 Passeio quântico contínuo no tempo na reta

Os vértices são os pontos (inteiros) da reta. Associamos cada vértice  $i$  da reta a um vetor da base computacional  $|i\rangle$ . Neste caso temos

$$H_{i,j} = \begin{cases} 2\gamma, & \text{se } i = j \\ -\gamma, & \text{se } i \neq j \text{ e são adjacentes} \\ 0, & \text{se } i \neq j \text{ e não são adjacentes} \end{cases}$$

Então

$$H|n\rangle = -\gamma|n-1\rangle + 2\gamma|n\rangle - \gamma|n+1\rangle.$$

Um dos valores mais importantes no contexto de passeios quânticos é o desvio padrão. Ele diz o quão rápido a partícula se espalha pelo grafo. Numericamente é possível ver que ele

é dado por  $\sigma(t) \approx 0,5t$  na reta. Já no caso clássico ele é proporcional a  $\sqrt{t}$ , ou seja, no caso quântico temos um ganho quadrático na velocidade com a qual a partícula se espalha na reta, o que é muito apropriado para algoritmos de busca, por exemplo.

## 3 Grafo total

O grafo total é uma generalização do grafo linha. Uma de suas principais aplicações é para se obter redes mais robustas e com mais tolerância às falhas (LI; GU; LEI, 2019; DÜNDAR; AYTAÇ, 2004). Neste capítulo estudaremos o grafo total e veremos alguns resultados envolvendo a decomposição espectral da matriz de adjacência do grafo total de um grafo regular.

### 3.1 Sobre o grafo total de um grafo

Um dos primeiros exemplos de quando se começa a estudar teoria de grafos é o grafo gerado a partir das pontes de Königsberg. Existe uma enorme variedade de problemas práticos que podem ser modelados com a ajuda de grafos. O que se faz, em geral, é transformar uma situação prática de tal forma que os vértices gerados representem certos objetos da situação e as arestas uma relação que esses objetos possuem entre si.

Não são somente as situações práticas que podem ser representadas através de grafos. Objetos matemáticos também podem ser representados com a ajuda de grafos. Como grafos são objetos matemáticos, surge naturalmente a ideia de gerar novos grafos a partir de um grafo original. Neste trabalho utilizaremos dois exemplos de tais construções, o grafo linha e o grafo total, nos dois casos chamaremos o grafo original de grafo raiz.

Em um grafo linha os vértices representam arestas do seu grafo raiz, de tal forma que tais vértices são adjacentes no grafo linha se as arestas que eles representam são adjacentes no grafo raiz. Na [Figura 1a](#) vemos uma forma de obter o grafo linha a partir do grafo raiz, marcando um vértice do grafo linha em cada aresta do grafo raiz e ligando os vértices do grafo linha quando as respectivas arestas forem adjacentes. De forma mais formal temos a seguinte definição.

**Definição 3.1.** O **grafo linha**  $L(G)$  é o grafo gerado a partir de um grafo  $G$  de tal forma que  $V(L(G)) = E(G)$  e dois vértices de  $L(G)$  são adjacentes se, e somente se, as respectivas arestas de  $G$  são adjacentes. O grafo  $G$  é chamado de **grafo raiz**.

Definido desta forma o grafo linha diz como as arestas do grafo raiz se relacionam, através da adjacência entre elas. Na [Figura 1b](#) temos representado como o grafo linha pode ser encarado como uma transformação de um grafo dado em um novo grafo. Essa transformação possui algumas propriedades que destacaremos ao longo do texto.

Observe que se duas arestas  $e_{u,v}$  e  $e_{u,w}$  são adjacentes entre si em  $G$ , então os seus respectivos vértices serão adjacentes em  $L(G)$ . Note também que o grau do vértice  $e_{uv}$  em

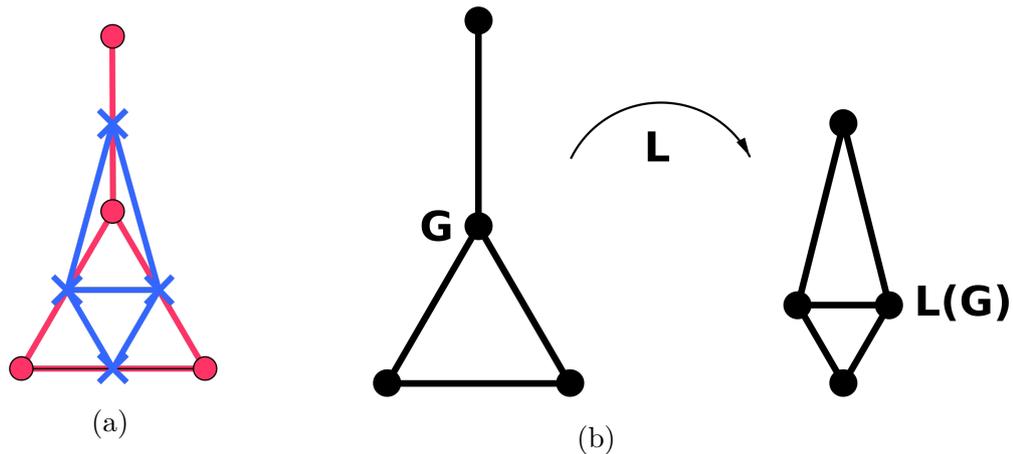


Figura 1 – Do lado esquerdo (a) temos um rascunho de como gerar um grafo linha em azul a partir de um grafo raiz em vermelho. Do lado direito (b) temos representada a transformação de um grafo  $G$  em seu grafo Linha  $L(G)$ .

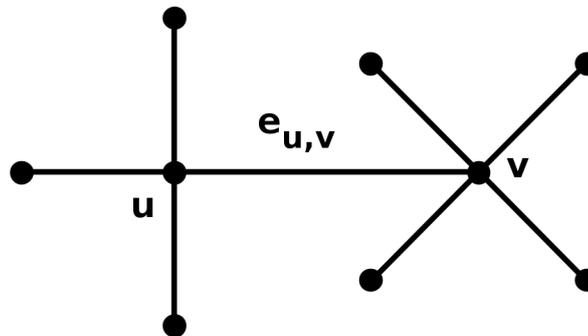


Figura 2 –  $e_{u,v}$  possui  $7 = 4 + 5 - 2$  arestas adjacentes.

$L(G)$  é dado pela soma dos graus de  $u$  e  $v$  em  $G$  menos dois. De fato, uma aresta  $e_{uv}$  é adjacente a todas as arestas incidentes a  $u$  menos ela própria, o mesmo valendo para  $v$ , como exemplo veja a [Figura 2](#).

Existem várias formas de se generalizar o conceito de grafo linha. Uma possibilidade seria trocar o grafo de sua definição por um multigrafo ou um grafo direcionado, por exemplo. Outra possibilidade para uma generalização seria representar, além das arestas do grafo raiz, os vértices do mesmo. É isso que fazemos no grafo total, onde os vértices representam os vértices e arestas do grafo raiz, de tal forma que os vértices do grafo total são adjacentes se eles representam vértices e arestas adjacentes ou incidentes no grafo raiz. De forma mais formal temos a seguinte definição.

**Definição 3.2.** O **grafo total**  $T(G)$  é o grafo gerado a partir de um grafo  $G$  de tal forma que  $V(T(G)) = V(G) \cup E(G)$  e dois vértices de  $T(G)$  são adjacentes se eles são adjacentes em  $G$  (no caso de termos dois vértices de  $G$  ou duas arestas de  $G$ ) ou são incidentes em  $G$  (no caso de termos um vértice e uma aresta de  $G$ ). O grafo  $G$  é chamado de **grafo raiz**.

**Observação 3.1.** Sejam  $V$  e  $E$  o conjunto de vértices do grafo total  $T(G)$  que representam,

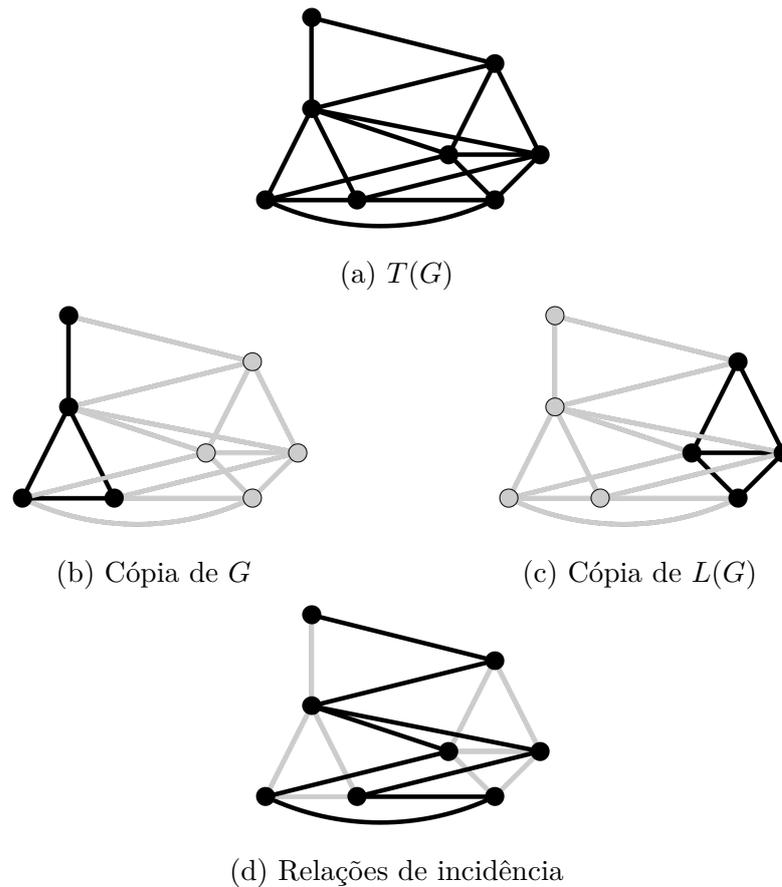


Figura 3 – A figura (a) representa  $T(G)$  por completo. A figura (b) destaca a parte de  $T(G)$  que é uma cópia de  $G$ . A figura (c) destaca a parte de  $T(G)$  que é uma cópia de  $L(G)$ . A figura (d) destaca a parte de  $T(G)$  que vem das relações de incidência de  $G$  entre vértices e arestas.

respectivamente, vértices e arestas do seu grafo raiz  $G$ . Chamaremos os vértices de  $V$  de vértices antigos e os de  $E$  de vértices novos. Temos que o subgrafo de  $T(G)$  induzido por  $V$  (respectivamente,  $E$ ) é isomorfo a  $G$  (respectivamente,  $L(G)$ ). De fato, como um antigo vértice é ligado a outro antigo vértice se, e somente se, eles forem adjacentes em  $G$  temos uma cópia de  $G$  em  $T(G)$ . O mesmo ocorre com os vértices novos e  $L(G)$ .

**Observação 3.2.** Cada vértice novo se conecta com dois vértices antigos. Além disso, cada vértice antigo  $u$  se conecta com  $d_u$  vértices novos, onde  $d_u$  é o grau de  $u$ .

Na Figura 3 representamos as observações anteriores para construir  $T(G)$  onde  $G$  é o grafo da Figura 1b. Em Figura 3b vemos a cópia de  $G$ , em Figura 3c vemos a cópia de  $L(G)$ , em Figura 3d temos os vértices novos e antigos se conectando e em Figura 3a temos  $T(G)$  por completo. A cópia de  $G$  em  $T(G)$  diz como os vértices de  $G$  se conectam, a cópia de  $L(G)$  como as arestas de  $G$  se conectam e as arestas restantes diz como os vértices de  $G$  incidem sobre as arestas de  $G$  e vice-versa.

## 3.2 Autovalores da matriz de adjacência do grafo total de um grafo regular

Como já vimos, existem diversos modelos de passeios quânticos. Nesta seção definiremos um novo modelo usando o passeio quântico contínuo no tempo como base. Chamaremos ele de passeio quântico total contínuo no tempo.

No passeio quântico contínuo no tempo padrão utilizamos a matriz de adjacência  $A_G$  do grafo  $G$  para definir sua dinâmica. Na sua versão total utilizaremos a matriz de adjacência  $A_{T(G)}$  do grafo total  $T(G)$ . Da **Observação 3.1** deduzimos que a matriz de adjacência do grafo total pode ser obtida através das matrizes de adjacências do grafo raiz e do grafo linha. De fato, se considerarmos a submatriz de  $A_{T(G)}$  com os rótulos apenas em  $V$  (respectivamente,  $E$ ) obtemos  $A_G$  (respectivamente,  $A_{L(G)}$ ).

Se particionarmos  $A_{T(G)}$  em blocos baseados no último parágrafo falta considerar os blocos com um rótulo em  $V$  e o outro em  $E$ . Pela definição de grafo total as entradas desses blocos vão ser iguais a 1 quando a aresta e o vértice considerados forem incidentes e 0 caso contrário. Note que esta propriedade é respeitada pela definição de matriz de incidência.

**Definição 3.3.** A **matriz de incidência**  $R_G$  de um grafo  $G$  é definida por

$$R(G)_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } v_i \in e_j, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.1)$$

Resumindo os últimos parágrafos, temos que o grafo  $T(G)$  consiste em uma cópia de  $G$ , onde aparecem os vértices de  $V(G)$ , e uma cópia de  $L(G)$ , onde aparecem os vértices de  $E(G)$ . Além disso, como em todo grafo cada aresta é incidente a dois vértices, cada vértice de  $T(G)$  da cópia de  $L(G)$  é conectado com dois vértices de  $T(G)$  da cópia de  $G$ . Portanto temos que a matriz de adjacência de  $T(G)$  será dada por uma matriz de blocos

$$M := A_{T(G)} = \begin{bmatrix} A & R \\ R^T & B \end{bmatrix}, \quad (3.2)$$

onde  $A = A_G$ ,  $R = R_G$  e  $B = A_{L(G)}$ .

**Definição 3.4.** Com a matriz de adjacência de  $T(G)$  podemos definir o **passeio quântico total contínuo no tempo** através do operador de evolução

$$U(t) = e^{-iMt}. \quad (3.3)$$

Sabemos que os autovalores do operador de evolução de um passeio quântico são úteis para se obter informações sobre o mesmo. Note que se  $\lambda_M$  é autovalor de  $M$  então

$e^{-i\lambda_M t_0}$  é autovalor de  $U(t_0)$ . Logo, existe uma forte relação entre os autovalores de  $M$  e  $U(t)$ . Por esse motivo estamos interessados nos autovalores da matriz de adjacência do grafo total. Como veremos adiante eles também têm forte relação com os autovalores do grafo raiz em grafos regulares, observe que daqui pra frente utilizaremos autovalor de um grafo para resumir autovalor da matriz de adjacência de um grafo. Para demonstrar a relação entre os autovalores de  $T(G)$  e  $G$  utilizaremos o seguinte lema.

**Lema 3.1.** *Seja  $G$  um grafo  $r$ -regular. Utilizando a mesma notação da Equação 3.2 temos que as seguintes igualdades são válidas*

$$RR^T = A + rI, \quad (3.4)$$

$$R^T R = B + 2I. \quad (3.5)$$

*Demonstração.* Todas as entradas da diagonal principal de  $A$  são zero. Logo,  $A + rI$  tem na diagonal principal só  $r$ 's e fora dela  $1$ 's e  $0$ 's definidos pela matriz de adjacência. Já  $RR^T$  terá por definição suas linhas e colunas associadas a vértices de  $G$ . Na diagonal principal  $(RR^T)_{vv}$  também só aparecerá  $r$ , pois cada aresta incidente a  $v$  contribuirá com 1 no somatório da multiplicação matricial e todo vértice de  $G$  tem grau  $r$ . Já fora da diagonal principal  $(RR^T)_{uv}$  só vai ser diferente de 0 quando  $u$  e  $v$  forem incidentes a uma mesma aresta  $uv$ , ou seja, quando  $u$  e  $v$  forem adjacentes. Neste caso, como o grafo é simples a entrada vai ser 1. Portanto,  $RR^T = A + rI$ .

A demonstração para  $R^T R = B + 2I$  é análoga à primeira igualdade, bastando observar que a matriz de adjacência  $B$  do grafo linha utiliza a propriedade de adjacência das arestas e que cada aresta é incidente a dois vértices. Observe que neste caso o grafo não precisa ser regular.  $\square$

Seja  $P_G(\lambda)$  o polinômio característico da matriz de adjacência de  $G$ . Com o auxílio desse último lema podemos demonstrar a relação entre os autovalores de um grafo regular  $G$  com os autovalores de  $T(G)$  enunciada na seguinte proposição.

**Proposição 3.1.** *(CVETKOVIC, 1973) Sejam  $G$  um grafo regular com  $m$  arestas e  $n$  vértices de grau  $r$  e  $\lambda_i$  os autovalores de  $G$ , para  $i \in \{1, \dots, n\}$ . Os autovalores de  $T(G)$  são  $-2$  com multiplicidade  $m - n$  e  $2n$  autovalores dados por*

$$\theta_i^\pm = \frac{1}{2}(2\lambda_i + r - 2 \pm \sqrt{4\lambda_i + r^2 + 4}), i \in \{1, \dots, n\}. \quad (3.6)$$

*Demonstração.* Por definição de polinômio característico temos que

$$\begin{aligned}
P_{T(G)}(\lambda) &= \begin{vmatrix} \lambda I + rI - RR^T & -R \\ -R^T & \lambda I + 2I - R^T R \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} \lambda I + rI - RR^T & -R \\ -(\lambda + 1 + r)R^T + R^T R R^T & \lambda I + 2I \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} \lambda I + rI - RR^T + \frac{R}{\lambda + 2} \left( -(\lambda + 1 + r)R^T + R^T R R^T \right) & 0 \\ -(\lambda + 1 + r)R^T + R^T R R^T & (\lambda + 2) I \end{vmatrix},
\end{aligned}$$

onde na primeira igualdade utilizamos o [Lema 3.1](#) e na segunda e terceira utilizamos a eliminação gaussiana.

Como na última igualdade temos o determinante de uma matriz triangular inferior em blocos temos que

$$\begin{aligned}
P_{T(G)}(\lambda) &= (\lambda + 2)^m \det \left( \lambda I - A + \frac{1}{\lambda + 2} (A + rI) (A - (\lambda + 1)I) \right) \\
&= (\lambda + 2)^{m-n} \det \left( A^2 - (2\lambda - r + 3)A + (\lambda^2 - (r - 2)\lambda - r)I \right) \\
&= (\lambda + 2)^{m-n} \prod_{i=1}^n \left( \lambda_i^2 - (2\lambda - r + 3)\lambda_i + \lambda^2 - (r - 2)\lambda - r \right) \\
&= (\lambda + 2)^{m-n} \prod_{i=1}^n \left( \lambda^2 - (2\lambda_i + r - 2)\lambda + \lambda_i^2 + (r - 3)\lambda_i - r \right).
\end{aligned}$$

Resolvendo a equação do segundo grau obtemos

$$P_{T(G)}(\lambda) = (\lambda + 2)^{m-n} \prod_{i=1}^n (\lambda - \theta_i^+) (\lambda - \theta_i^-). \quad (3.7)$$

□

Sabemos que os autovalores de um operador de evolução de um passeio quântico nos ajudam a analisar o algoritmo de busca. Portanto, encontrar o hitting time do passeio quântico total contínuo no tempo em grafos regulares é uma primeira análise a ser feita. Desde que tenhamos os autovalores do grafo regular, o que é o caso de grafos fortemente regulares ou de ciclos, por exemplo.

### 3.3 Autovetores da matriz de adjacência do grafo total de um grafo regular

Já observamos que os autovalores de um grafo regular  $G$  e de seu grafo total  $T(G)$  possuem uma relação direta. Dessa forma surge naturalmente a pergunta se os autovetores de ambas também possuem alguma relação.

**Lema 3.2.** *Seja  $G$  um grafo. O autoespaço associado ao autovalor  $-2$  do seu grafo linha  $L(G)$  é igual ao núcleo de sua matriz de incidência  $R_G$ .*

*Demonstração.* Do [Lema 3.1](#) temos que  $R^T R = A_{L(G)} + 2I$ . Se  $A_{L(G)}\mathbf{v} = -2\mathbf{v}$  então temos que  $R^T R\mathbf{v} = -2\mathbf{v} + 2\mathbf{v} = 0$ . Logo  $\mathbf{v}^T R^T R\mathbf{v} = |R\mathbf{v}|^2 = 0$ . Se  $R\mathbf{v} = 0$  vale que  $0 = A_{L(G)}\mathbf{v} + 2\mathbf{v}$ . Portanto  $A_{L(G)}\mathbf{v} = -2\mathbf{v}$  se, e somente se,  $R\mathbf{v} = 0$ .  $\square$

**Lema 3.3.** *Seja  $R$  a matriz de incidência de um grafo conexo  $G$ . Então a imagem de  $R$  tem dimensão  $n - 1$  se  $G$  é bipartido e  $n$  se  $G$  não é bipartido.*

*Demonstração.* Sejam  $R_1, \dots, R_n$  as linhas de  $R$ . Suponhamos que elas sejam linearmente independentes. Neste caso, existem  $c_1, \dots, c_n$  tais que

$$c_1 R_1 + \dots + c_n R_n = 0, \quad (3.8)$$

com pelo menos um  $c_i \neq 0$ . Se  $e_k$  é uma aresta que é incidente aos vértices  $v_i$  e  $v_j$  então  $R_{ik} = R_{jk} = 1$  e  $R_{lk} = 0$ , para  $l \neq i, j$ . Logo, para  $v_i$  adjacente a  $v_j$ ,  $c_i$  deve ser igual a  $-c_j$ . Desta forma se  $v_{i_1}, \dots, v_{i_r}$  é um caminho de  $G$  temos que  $c_{i_1}, \dots, c_{i_r}$  alternam seus valores entre  $c$  e  $-c$ . Se for possível atribuir  $c$ 's e  $-c$ 's para todo  $c_i$  obtemos uma bipartição dos vértices de  $G$ . Logo se  $G$  é bipartido temos que a dimensão do núcleo de  $R^T$  é 1 e, portanto a dimensão da imagem de  $R$  é  $n - 1$ . Já se  $G$  não é bipartido temos, por absurdo, que  $R_1, \dots, R_n$  é linearmente independente e, portanto, a dimensão da imagem de  $R$  é  $n$ .  $\square$

**Lema 3.4** ((CVETKOVIĆ; ROWLINSON; SIMIĆ, 2009)). *Seja  $G$  um grafo. A multiplicidade do autovalor  $-2$  do seu grafo linha  $L(G)$  é  $m - n + 1$  se  $G$  é bipartido e  $m - n$  se  $G$  não é bipartido.*

O teorema a seguir é uma novidade e foi provado por mim.

**Teorema 3.1.** *Sejam  $G$  um grafo conexo  $r$ -regular com  $n$  vértices,  $m$  arestas e  $r \geq 2$ . Suponhamos que os autovalores de  $G$  são dados por  $r = \lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n$  e seus respectivos autovetores são  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ . Definimos*

$$\theta_i^\pm = \frac{2\lambda_i + r - 2 \pm \sqrt{4\lambda_i + r^2 + 4}}{2}, \text{ para } i \in \{1, \dots, n\} \quad (3.9)$$

e

$$\mathbf{X}_i^\pm = k \begin{pmatrix} (2 - r - \lambda_i + \theta_i^\pm) \mathbf{v}_i \\ R_G^T \mathbf{v}_i \end{pmatrix}, \text{ para } i \in \{1, \dots, n\} \quad (3.10)$$

onde  $k = \frac{1}{\sqrt{(2 - r - \lambda_i + \theta_i^\pm)^2 + \lambda_i + r}}$ .

- (a) Se  $G$  não é bipartido temos que os autovalores de  $T(G)$  são dados por  $\theta_i^\pm$ , com  $i \in \{1, \dots, n\}$  e  $-2$  com multiplicidade  $m - n$  com os respectivos autovetores dados por  $\mathbf{X}_i^\pm$  e

$$\mathbf{Y}_j = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{y}_j \end{pmatrix}, j \in \{1, \dots, m - n\} \quad (3.11)$$

onde  $\{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{m-n}\}$  é uma base ortonormal do núcleo de  $R_G$ .

- (b) Se  $G$  é bipartido com  $V(G) = V_1 \cup V_2$  sendo suas partições temos que os autovalores de  $T(G)$  são dados por  $\theta_i^\pm$ , com  $i \in \{1, \dots, n - 1\}$ ,  $-r$  e  $-2$  com multiplicidade  $m - n + 1$  com os respectivos autovetores dados por  $\mathbf{X}_i^\pm$ ,

$$\mathbf{Z} = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{pmatrix} \mathbf{J}_1 \\ -\mathbf{J}_2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

com  $\mathbf{J}_i$  sendo o vetor de dimensão  $|V_i|$  com todas as entradas iguais a 1 e

$$\mathbf{Y}_j = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{y}_j \end{pmatrix}, j \in \{1, \dots, m - n + 1\} \quad (3.13)$$

onde  $\{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{m-n}\}$  é uma base ortonormal do núcleo de  $R_G$ .

*Demonstração.* (a) Primeiramente notemos que

$$A_{\mathcal{T}(G)} = \begin{pmatrix} A_G & R_G \\ R_G^T & A_{\mathcal{L}(G)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_G R_G^T - rI_n & R_G \\ R_G^T & R_G^T R_G - 2I_m \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Provaremos agora que  $A_{\mathcal{T}(G)} \mathbf{X}_i^\pm = \theta_i^\pm \mathbf{X}_i^\pm$ . Temos que, para  $i \in \{1, \dots, n\}$

$$A_{\mathcal{T}(G)} \mathbf{X}_i^\pm = \begin{pmatrix} A_G & R_G \\ R_G^T & R_G^T R_G - 2I_m \end{pmatrix} k \begin{pmatrix} (2 - r - \lambda_i + \theta_i^\pm) \mathbf{v}_i \\ R_G^T \mathbf{v}_i \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

$$= k \begin{pmatrix} (2 - r - \lambda_i + \theta_i^\pm) A_G \mathbf{v}_i + R_G R_G^T \mathbf{v}_i \\ (2 - r - \lambda_i + \theta_i^\pm) R_G^T \mathbf{v}_i + R_G^T R_G R_G^T \mathbf{v}_i - 2R_G^T \mathbf{v}_i \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

$$= k \begin{pmatrix} (2 - r - \lambda_i + \theta_i^\pm) \lambda_i \mathbf{v}_i + \lambda_i \mathbf{v}_i + r \mathbf{v}_i \\ (2 - r - \lambda_i + \theta_i^\pm) R_G^T \mathbf{v}_i + \lambda_i R_G^T \mathbf{v}_i + r R_G^T \mathbf{v}_i - 2R_G^T \mathbf{v}_i \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

$$= k \begin{pmatrix} (3\lambda_i + r - r\lambda_i - \lambda_i^2 + \theta_i^\pm \lambda_i) \mathbf{v}_i \\ \theta_i^\pm R_G^T \mathbf{v}_i \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

$$= k \begin{pmatrix} \theta_i^\pm (2 - r - \lambda_i + \theta_i^\pm) \mathbf{v}_i \\ \theta_i^\pm R_G^T \mathbf{v}_i \end{pmatrix} = \theta_i^\pm \mathbf{X}_i^\pm \quad (3.19)$$

Para obter a última igualdade acima notemos que ambos os lados da equação são iguais a  $\frac{1}{2}(4\lambda_i - r\lambda_i + 2r \pm \lambda_i \sqrt{4\lambda_i + r^2 + 4})$ .

Da definição de  $\mathbf{Y}_j$  obtemos que, para  $j \in \{1, \dots, m - n\}$

$$A_{\mathcal{T}(G)} \mathbf{Y}_j = \begin{pmatrix} A_G & R_G \\ R_G^T & R_G^T R_G - 2I_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{y}_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ -2\mathbf{y}_j \end{pmatrix} = -2\mathbf{Y}_j \quad (3.20)$$

Portanto  $\{\mathbf{X}_i^\pm\} \cup \{\mathbf{Y}_j\}$  são os autovetores de  $\mathcal{T}(G)$ , para finalizar a demonstração devemos mostrar que de fato são autovetores ortonormais.

Notemos que  $\mathbf{Y}_i^T \mathbf{Y}_j = \mathbf{y}_i^T \mathbf{y}_j = \delta_{ij}$ . Além disso  $(\mathbf{X}_i^\pm)^T \mathbf{Y}_j = \mathbf{v}_i^T R \mathbf{y}_j = 0$ . Por fim, observemos que

$$\begin{aligned} (\mathbf{X}_i^\pm)^T \mathbf{X}_j^\pm &= \frac{(2 - r - \lambda_i + \theta_i^\pm)(2 - r - \lambda_j + \theta_j^\pm) + \lambda_j + r}{\sqrt{(2 - r - \lambda_i + \theta_i^\pm)^2 + \lambda_i + r} \sqrt{(2 - r - \lambda_j + \theta_j^\pm)^2 + \lambda_j + r}} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_j \\ &= \delta_{+-} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (3.21)$$

(b) A primeira parte é similar a prova de (a). Note que se  $G$  é um grafo  $r$ -regular bipartido com  $V(G) = V_1 \cup V_2$  então  $\lambda_n = -r$  é o menor autovalor de  $G$  com correspondente autovetor unitário  $\frac{1}{\sqrt{n}} \begin{pmatrix} \mathbf{J}_1 \\ -\mathbf{J}_2 \end{pmatrix}$ . Portanto  $A_{\mathcal{T}(G)} \mathbf{Z} = -r\mathbf{Z}$ .  $\square$

## 4 Andando em vértices e arestas de um grafo com o passeio quântico contínuo no tempo

A estrutura espacial de passeios quânticos a tempo discreto em grafos é dada por (1) o conjunto de arcos no modelo com moeda (HIGUCHI et al., 2014), (2) o conjunto de arestas no modelo de Szegedy (SZEGEDY, 2004) e o conjunto de vértices no modelo escalonado (PORTUGAL et al., 2016). Por outro lado, a estrutura espacial do passeio quântico contínuo no tempo é o conjunto de vértices (FARHI; GUTMANN, 1998). Neste capítulo definimos um passeio quântico contínuo no tempo que se localiza em ambos, nos vértices e nas arestas do grafo de forma matematicamente consistente. Nós o chamaremos de passeio quântico *total*.

Seja  $G$  um grafo com o conjunto de vértices dado por  $V(G)$  e com o conjunto de arestas dado por  $E(G)$ . Associaremos a este grafo um espaço de Hilbert de dimensão  $(|V(G)| + |E(G)|)$  e gerado por  $\{|v\rangle : v \in V(G) \cup E(G)\}$ . Através da matriz de adjacência de  $A_{T(G)}$  do grafo total  $T(G)$  podemos definir o operador de evolução do passeio quântico total por

$$U(t) = e^{-i\gamma Ht},$$

onde  $\gamma$  é um parâmetro real e positivo e  $H = A_{T(G)}$ . Neste modelo, se o caminhante está no vértice  $v$ , após um tempo infinitesimal, o caminhante pode permanecer e passar em qualquer vértice vizinho  $v'$  e para qualquer aresta incidente a  $v$ . Se o caminhante está em uma aresta  $e$ , depois de um tempo infinitesimal, o caminhante pode passar ou permanecer em qualquer aresta que tenha um vértice em comum com  $e$  ou para qualquer vértice que pertence a  $e$ .

O passeio quântico total em um grafo  $G$  é equivalente ao passeio quântico contínuo no tempo em  $T(G)$ , com a vantagem de que a nova formulação divide a estrutura espacial em duas partes distintas. Esta divisão pode ser explorada em aplicações tais como busca e análise de decoerência, no sentido de checar quando arestas e vértices se comportam da mesma forma ou não.

O algoritmo de busca é definido realizando uma modificação no Hamiltoniano do modelo total através de uma perturbação que depende da localização do elemento marcado  $w$  da seguinte maneira

$$H = -\gamma A - |w\rangle\langle w|.$$

É interessante determinar quando o tipo do elemento marcado influencia na complexidade computacional da busca. A probabilidade de encontrar o vértice marcado no tempo  $t$  é

$$p(t) = |\langle w|\psi(t)\rangle|^2, \quad (4.1)$$

onde  $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$  é o estado do passeio quântico no instante  $t$  e  $|\psi(0)\rangle$  é o estado inicial. O objetivo do algoritmo é encontrar os valores ótimos de  $t$  e  $\gamma$  de tal forma que a probabilidade de sucesso seja a maior possível.

## 4.1 Método para achar a complexidade computacional de algoritmos de busca

As referências (LUGÃO et al., 2022; BEZERRA; LUGÃO; PORTUGAL, 2021) descreveram um método para encontrar a complexidade computacional de algoritmos de busca quando o grafo tem múltiplos vértices marcados. Nesta subseção, revisaremos este método para o caso de um único elemento marcado, o qual é similar ao descrito em (CHAN et al., 2022). Dado um operador  $U$ , denotaremos o espectro de  $U$  por  $\sigma(U)$ . Suponhamos que a matriz de adjacência  $A$  do grafo total tenha  $q + 1$  autovalores distintos  $\phi_0 > \phi_1 > \dots > \phi_q$ . Denotemos por  $P_\ell$  o projetor ortogonal no autoespaço de  $A$  associado ao autovalor  $\phi_\ell$  para  $0 \leq \ell \leq q$ , de tal forma que pelo teorema espectral tenhamos

$$A = \sum_{\ell=0}^q \phi_\ell P_\ell.$$

Sejam  $\lambda$  e  $|\lambda\rangle$  um autovalor e um autovetor normalizado de  $H$ , respectivamente. A seguinte proposição mostra que o Hamiltoniano  $H$  e o operador  $-\gamma A$  podem compartilhar autovalores e autovetores em comum:

**Proposição 4.1.** *Sejam  $\lambda$  e  $|\lambda\rangle$  um autovalor e um autovetor normalizado de  $H$ .  $\lambda \in \sigma(-\gamma A)$  e  $(-\gamma A)|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$  se, e somente se,  $\langle w|\lambda\rangle = 0$ .*

*Demonstração.* Realizando o produto pela direita de  $|\lambda\rangle$  por

$$H = -\gamma A - |w\rangle\langle w|$$

obtemos

$$\lambda|\lambda\rangle = -\gamma A|\lambda\rangle - |w\rangle\langle w|\lambda\rangle.$$

Da última igualdade temos que se  $\langle w|\lambda\rangle = 0$  então  $\lambda|\lambda\rangle = -\gamma A|\lambda\rangle$ . Da mesma igualdade temos que se  $\lambda|\lambda\rangle = -\gamma A|\lambda\rangle$  então  $|w\rangle\langle w|\lambda\rangle = 0$  e, portanto  $\langle w|\lambda\rangle = 0$   $\square$

Note que se  $\langle w|\lambda\rangle = 0$  então o autovetor  $|\lambda\rangle$  não faz diferença no cálculo da probabilidade  $p(t)$ , como pode ser visto na Equação 4.1. Os autovalores  $\lambda$  associados com tais autovetores estão no espectro de  $-\gamma A$ , como pode ser visto na proposição anterior. Desta forma, assumimos que  $\langle w|\lambda\rangle \neq 0$  e, portanto,  $\lambda \notin \sigma(-\gamma A)$ .

Usando a definição de  $H$  temos que

$$\lambda|\lambda\rangle = -\gamma A|\lambda\rangle - |w\rangle\langle w|\lambda\rangle.$$

Realizando uma multiplicação pela esquerda pelo projetor  $P_\ell$  obtemos

$$\lambda P_\ell |\lambda\rangle = -\gamma \phi_\ell P_\ell |\lambda\rangle - P_\ell |w\rangle \langle w | \lambda\rangle.$$

Isolando  $P_\ell |\lambda\rangle$  e assumindo que  $\lambda \notin \sigma(-\gamma A)$ , obtemos que

$$P_\ell |\lambda\rangle = -\frac{\langle w | \lambda\rangle}{\lambda + \gamma \phi_\ell} P_\ell |w\rangle. \quad (4.2)$$

Como  $\sum_{\ell=0}^q P_\ell = I$ , temos que

$$\langle w | \lambda\rangle = \sum_{\ell=0}^q \langle w | P_\ell |\lambda\rangle.$$

Realizando o produto pela esquerda por  $\langle w |$  na Equação 4.2 e depois realizando um somatório em  $\ell$ , obtemos que

$$\sum_{\ell=0}^q \langle w | P_\ell |\lambda\rangle = -\sum_{\ell=0}^q \frac{\langle w | \lambda\rangle}{\lambda + \gamma \phi_\ell} \langle w | P_\ell |w\rangle.$$

Logo

$$\langle w | \lambda\rangle = -\langle w | \lambda\rangle \sum_{\ell=0}^q \frac{\|P_\ell |w\rangle\|^2}{\lambda + \gamma \phi_\ell}$$

e como supomos  $\langle w | \lambda\rangle \neq 0$  concluímos que

$$\sum_{\ell=0}^q \frac{\|P_\ell |w\rangle\|^2}{\lambda + \gamma \phi_\ell} = -1. \quad (4.3)$$

Normalmente, o spectral gap do Hamiltoniano perturbado tende para zero quando o número de vértices do grafo analisado cresce. Assumimos que, assintoticamente, a complexidade computacional do algoritmo de busca depende exclusivamente de dois autovalores  $\lambda^\pm$  que diferem de  $-\gamma \phi_0$  por um  $\epsilon$  que tende a zero, como vemos na equação

$$\lambda^\pm = -\gamma \phi_0 \pm \epsilon + O(\epsilon^2). \quad (4.4)$$

Desta forma, o spectral gap é assintoticamente  $2\epsilon > 0$ . Equação 4.3 simplifica para

$$\sum_{\ell=0}^q \frac{\|P_\ell |w\rangle\|^2}{\gamma(\phi_\ell - \phi_0) \pm \epsilon} = -1. \quad (4.5)$$

Realizando uma expansão de Taylor de segunda ordem em  $\epsilon$  obtemos

$$\langle w | P_0 |w\rangle \pm \left(1 - \frac{S_1}{\gamma}\right) \epsilon - \frac{S_2}{\gamma^2} \epsilon^2 = 0, \quad (4.6)$$

onde

$$S_1 = \sum_{\ell=1}^q \frac{\|P_\ell |w\rangle\|^2}{\phi_0 - \phi_\ell} \quad (4.7)$$

e

$$S_2 = \sum_{\ell=1}^q \frac{\|P_\ell|w\rangle\|^2}{(\phi_0 - \phi_\ell)^2}. \quad (4.8)$$

A Equação 4.6 não pode possuir um termo linear. Caso contrário, o termo  $\pm\epsilon$  não ocorreria na hipótese da equação Equação 4.4. Então,

$$\gamma = S_1 \quad (4.9)$$

e

$$\epsilon = \frac{S_1 \|P_0|w\rangle\|}{\sqrt{S_2}}. \quad (4.10)$$

Usando a Equação 4.1 e um conjunto ortonormal  $\{|\lambda\rangle\}$  de autovetores de  $H$ , a probabilidade de achar um vértice marcado como função de  $t$  é

$$p(t) = \left| \sum_{\lambda} e^{-i\lambda t} \langle w|\lambda\rangle \langle \lambda|\psi(0)\rangle \right|^2.$$

Os autovalores  $\lambda \notin \sigma(-\gamma A)$  são raízes da equação 4.5. com o objetivo de simplificar o cálculo, vamos assumir que a probabilidade de sucesso depende apenas de  $\lambda^\pm$  e dos seus autovetores associados  $|\lambda^\pm\rangle$ . Além disso, assumimos que assintoticamente

$$\langle \lambda^+|\psi(0)\rangle \langle w|\lambda^+\rangle = -\langle \lambda^-|\psi(0)\rangle \langle w|\lambda^-\rangle + o(1). \quad (4.11)$$

Com essas hipóteses, a probabilidade de achar o elemento marcado se reduz a

$$p(t) = 4 \left| \langle \lambda^+|\psi(0)\rangle \right|^2 \left| \langle w|\lambda^+\rangle \right|^2 \sin^2 \epsilon t + o(1) + o(\epsilon t). \quad (4.12)$$

Então, o tempo de execução ótimo é

$$t_{\text{opt}} = \frac{\pi}{2\epsilon} \quad (4.13)$$

a probabilidade de sucesso é

$$p_{\text{succ}} = 4 \left| \langle \lambda^+|\psi(0)\rangle \right|^2 \left| \langle w|\lambda^+\rangle \right|^2 + o(1). \quad (4.14)$$

Existem diversos exemplos na literatura de grafos que obedecem às hipóteses que assumimos como verdadeiras (CHILDS; GOLDSTONE, 2004; TANAKA; SABRI; PORTUGAL, 2022).

Usando a (Equação 4.2) e

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

obtemos

$$\frac{1}{\left| \langle w|\lambda^\pm\rangle \right|^2} = \sum_{\ell=0}^q \frac{\|P_\ell|w\rangle\|^2}{(\lambda^\pm + \gamma\phi_\ell)^2}.$$

Realizando uma mudança de fase global em  $|\lambda^\pm\rangle$ , obtemos  $|\langle w|\lambda^\pm\rangle| = \langle w|\lambda^\pm\rangle$ . Fazendo o limite  $\epsilon \rightarrow 0$ , conseguimos

$$\langle w|\lambda^\pm\rangle = \frac{S_1}{\sqrt{2}\sqrt{S_2}}. \quad (4.15)$$

Para concluir nossos objetivos falta encontrar  $\langle \lambda^\pm|\psi(0)\rangle$ . Se o grafo total é regular e conexo, a sobreposição uniforme é um autovetor de  $\exp(-i\gamma A)$  e  $\exp(-i\gamma\phi_0)$  é o seu respectivo autovalor com multiplicidade 1, onde  $\phi_0$  é o maior autovalor do grafo. Neste caso, usando a [Equação 4.2](#) com  $\ell = 0$  obtemos

$$\langle \psi(0)|\lambda^\pm\rangle = -\frac{\langle w|\lambda^\pm\rangle\langle \psi(0)|w\rangle}{\lambda^\pm + \gamma\phi_0}.$$

Como todos os termos do lado direito da última igualdade são conhecidos, temos então uma forma de conseguir  $\langle \psi(0)|\lambda^\pm\rangle$ . Tomando  $|\psi(0)\rangle$  como a sobreposição uniforme e fazendo o limite  $\epsilon \rightarrow 0$ , obtemos

$$\langle \psi(0)|\lambda^\pm\rangle = \mp \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{N}\|P_0|w\rangle\|}, \quad (4.16)$$

onde  $N$  é o número de vértices do grafo total. Note que a [Equação 4.11](#) é consistente com a [Equação 4.15](#) e a [Equação 4.16](#).

Se utilizarmos a técnica de amplificação de amplitude ([PORTUGAL, 2018](#)), a complexidade computacional do algoritmo de busca é dada por  $t_{\text{opt}}/\sqrt{p_{\text{succ}}}$ . Usando a [Equação 4.13](#) e a [Equação 4.14](#), o tempo total de execução, com probabilidade  $\Omega(1)$ , se torna

$$t_{\text{run}} = \frac{\pi S_2}{2S_1^2}\sqrt{N}. \quad (4.17)$$

Note que a complexidade computacional do algoritmo de busca usando a amplificação de amplitude não depende de  $\|P_0|w\rangle\|$ . Além disso, a complexidade computacional é  $O(\sqrt{N})$  se  $S_2$  tem a mesma ordem de grandeza de  $S_1^2$ .

## 4.2 Busca quântica com o passeio quântico total no grafo completo

Seja  $K_n$  o grafo completo com  $n$  vértices. O grafo total  $T(K_n)$  é isomórfico ao grafo de Johnson  $J(n+1, 2)$  como mostra a próxima proposição:

**Proposição 4.2.** *O grafo total  $T(K_n)$  do grafo completo  $K_n$  é isomórfico ao grafo de Johnson  $J(n+1, 2)$ .*

*Demonstração.* Adotamos a seguinte convenção: um vértice arbitrário de  $T(K_n)$  tem rótulo  $i$  ou  $\{i, j\}$  para  $1 \leq i, j \leq n$  dependendo do correspondente elemento do grafo raiz  $K_n$  ser um vértice ou uma aresta, respectivamente. Um vértice arbitrário  $v$  de  $J(n+1, 2)$  tem rótulo  $v = \{i, j\}$  para  $1 \leq i, j \leq n+1$  e dois vértices  $v$  e  $w$  são adjacentes se, e somente se,

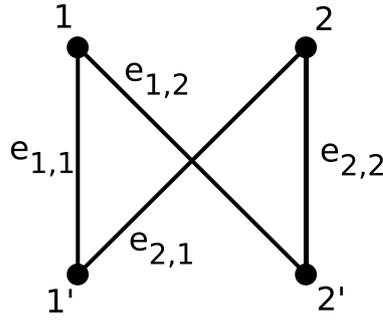


Figura 4 –  $K_{2,2}$  com os rótulos dos vértices e das arestas.

$|v \cap w| = 1$ . O isomorfismo entre  $T(K_n)$  e  $J(n+1, 2)$  é estabelecido mapeando o vértice  $\{i, j\}$  de  $T(K_n)$  no vértice  $\{i, j\}$  de  $J(n+1, 2)$  e mapeando o vértice  $i$  de  $T(K_n)$  no vértice  $\{i, n+1\}$  de  $J(n+1, 2)$ . É uma verificação direta ver que dois vértices são adjacentes em  $T(K_n)$  se, e somente se, os correspondentes vértices são adjacentes em  $J(n+1, 2)$  usando o fato de que  $J(n+1, 2)$  é o grafo linha de  $K_{n+1}$ .  $\square$

Nos voltemos para o problema de realizar buscas usando o passeio quântico total no grafo completo. Neste caso, o elemento alvo pode ser um vértice ou uma aresta de  $K_n$ . A primeira conclusão é que a complexidade computacional não depende da localização do elemento marcado pois  $T(K_n)$  é fortemente regular (LIU; WANG, 2021). O algoritmo de busca quântica em  $J(n+1, 2)$  e em grafos fortemente regulares foram estudados em (TANAKA; SABRI; PORTUGAL, 2022; JANMARK; MEYER; WONG, 2014), que mostraram que a probabilidade de achar um vértice marcado de  $J(n+1, 2) \cong T(K_n)$  é

$$p(t) = \left(1 + O\left(\frac{1}{n}\right)\right) \sin^2 \frac{t}{\sqrt{N}}, \quad (4.18)$$

onde  $N$  é o número de vértices mais o número de arestas de  $K_n$ . Então, o tempo de execução ótimo é

$$t_{\text{run}} = \frac{\pi\sqrt{N}}{2}, \quad (4.19)$$

e a probabilidade de sucesso assintoticamente é 1.

### 4.3 Busca quântica com o passeio quântico total no grafo bipartido completo

O grafo bipartido completo com  $n$  vértices em cada partição recebe os rótulos conforme exemplificado na Figura 4. Nesta seção procuramos analisar o algoritmo de busca quântica para um vértice marcado e uma aresta marcada. O seguinte lema fornece os autovetores de  $K_{n,n}$ .

**Lema 4.1.** Os autovetores ortonormais de  $K_{n,n}$  são dados pelas equações (4.20-4.23) com autovalores dados por  $-n$ ,  $0$ ,  $0$  e  $n$ , respectivamente.

$$|v_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left( \sum_{i=1}^n |i\rangle + |i'\rangle \right), \quad (4.20)$$

$$|v_k\rangle = \sqrt{\frac{k}{k+1}} \left( |k+1\rangle - \sum_{i=1}^k \frac{1}{k} |i\rangle \right), \quad (4.21)$$

onde  $A_{K_{n,n}}|v_k\rangle = 0$  para  $k \in \{1, \dots, n-1\}$  e  $A_{K_{n,n}}|v_k\rangle = 0$ .

$$|v_{k'}\rangle = \sqrt{\frac{k}{k+1}} \left( |(k+1)'\rangle - \sum_{i=1}^k \frac{1}{k} |i'\rangle \right), \quad (4.22)$$

onde  $A_{K_{n,n}}|v_{k'}\rangle = 0$  para  $k \in \{1, \dots, (n-1)\}$ .

$$|v_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left( \sum_{i=1}^n |i\rangle - |i'\rangle \right), \quad (4.23)$$

onde  $A_{K_{n,n}}|v_n\rangle = n|v_n\rangle$ .

*Demonstração.* Verificar que a norma de tais vetores é igual a 1 nos 4 casos é direto. Note primeiramente que aplicando a matriz de adjacência de  $K_{n,n}$  a um vetor da base computacional obtemos  $A_{K_{n,n}}|i\rangle = \sum_{j=1}^n |j'\rangle$  e  $A_{K_{n,n}}|i'\rangle = \sum_{j=1}^n |j\rangle$ . Desta forma temos que

$$\begin{aligned} A_{K_{n,n}}|v_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2n}} \sum_{i=1}^n A_{K_{n,n}}|i\rangle + A_{K_{n,n}}|i'\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2n}} \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^n |j'\rangle + \sum_{j=1}^n |j\rangle \right) \\ &= \frac{n}{\sqrt{2n}} \sum_{j=1}^n |j'\rangle + |j\rangle \\ &= n|v_n\rangle. \end{aligned}$$

Além disso,

$$\begin{aligned} A_{K_{n,n}}|v_k\rangle &= A_{K_{n,n}}|k+1\rangle - \sum_{i=1}^k \frac{A_{K_{n,n}}|i\rangle}{k} \\ &= \sum_{j=1}^n |j'\rangle - \sum_{i=1}^k \frac{\sum_{j=1}^n |j'\rangle}{k} \\ &= \sum_{j=1}^n |j'\rangle - \sum_{j=1}^n |j'\rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

Por fim

$$\begin{aligned}
 A_{K_{n,n}}|v_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2n}} \sum_{i=1}^n A_{K_{n,n}}|i\rangle - A_{K_{n,n}}|i'\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2n}} \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^n |j'\rangle - \sum_{j=1}^n |j\rangle \right) \\
 &= \frac{-n}{\sqrt{2n}} \sum_{j=1}^n |j\rangle - |j'\rangle \\
 &= -n|v_0\rangle
 \end{aligned}$$

Para provar que esses autovalores são ortogonais temos que

$$\langle v_n|v_0\rangle = n - n = 0, \quad (4.24)$$

$$\langle v_n|v_k\rangle = \langle v_0|v_k\rangle = \sqrt{\frac{k}{k+1}} \left(1 - k\frac{1}{k}\right) = 0. \quad (4.25)$$

□

Já o lema a seguir fornece uma base ortonormal para o núcleo da matriz de incidência de  $K_{n,n}$ .

**Lema 4.2.** *O núcleo da matriz de incidência de  $K_{n,n}$  possui base ortonormal definida pela seguinte equação*

$$\begin{aligned}
 |w_{i,j}\rangle &= \sqrt{h_{i,j}} \left( |e_{i+1,j+1}\rangle + \sum_{k_2=1}^j \sum_{k_1=1}^i \frac{1}{ij} |e_{k_1,k_2}\rangle - \sum_{k_1=1}^i \frac{1}{i} |e_{k_1,j+1}\rangle \right. \\
 &\quad \left. - \sum_{k_2=1}^j \frac{1}{j} |e_{i+1,k_2}\rangle \right) \\
 |w_{i,j}\rangle &= \sqrt{h_{i,j}} \sum_{k_2=1}^{j+1} \sum_{k_1=1}^{i+1} \frac{(-i)^{\delta_{k_1,i+1}} (-j)^{\delta_{k_2,j+1}}}{ij} |e_{k_1,k_2}\rangle, \quad (4.26)
 \end{aligned}$$

onde  $h_{i,j} = \frac{ij}{ij + i + j + 1}$  para  $i, j \in \{1, \dots, (n-1)\}$ .

*Demonstração.* Note primeiramente que  $R_{K_{n,n}}$  tem o seguinte formato

$$R_{K_{n,n}} = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 & \cdots & 1 \\ I_n & & & I_n & & \cdots & & I_n & & \end{bmatrix}.$$

Dividimos  $R_{K_{n,n}}$  em duas partes, a primeira com as  $n$  primeiras linhas e a segunda com as  $n$  últimas linhas. Fazendo esta divisão temos que a  $i$ -ésima linha da primeira parte vai

atuar em  $|e_{i,k}\rangle$ , com  $i$  fixo e  $k$  variando de 1 a  $n$ . Da mesma forma a  $j$ -ésima linha da segunda parte vai atuar em  $|e_{k,j}\rangle$ , com  $j$  fixo e  $k$  variando de 1 até  $n$ . Mas como

$$\sum_{k_1=1}^{i+1} \frac{(-i)^{\delta_{k_1,i+1}}(-j)^{\delta_{j_0,j+1}}}{ij} |j_0\rangle = (-j)^{\delta_{j_0,j+1}} \left( -\frac{1}{j} + \sum_{k_1|j_0\rangle=1}^i \frac{1}{ij} \right) |j_0\rangle = 0,$$

temos que  $R_{K_{n,n}}|w_{i,j}\rangle = 0, \forall i, j$ .

Agora provaremos que  $\langle w_{i,j}|w_{i',j'}\rangle = \delta_{i,i'}\delta_{j,j'}$ . Note que

$$\begin{aligned} \langle w_{i,j}|w_{i',j'}\rangle &= \\ \sqrt{h_{i,j}}\sqrt{h_{i',j'}} &\sum_{k_1,k_2,k_3,k_4=1}^{i+1,j+1,i'+1,j'+1} \frac{(-i)^{\delta_{k_1,i+1}}(-j)^{\delta_{k_2,j+1}}(-i')^{\delta_{k_3,i'+1}}(-j')^{\delta_{k_4,j'+1}}}{ijj'j'} \delta_{k_1,k_3}\delta_{k_2,k_4}. \end{aligned}$$

Sem perda de generalidade, vamos assumir que  $i \leq i'$  e  $j \leq j'$ . Desta forma dividimos a equação acima em três casos:

Caso 1 ( $i < i', j < j'$ ): Neste caso a equação simplifica para

$$\langle w_{i,j}|w_{i',j'}\rangle = \sqrt{h_{i,j}}\sqrt{h_{i',j'}} \sum_{k_1,k_2=1}^{i+1,j+1} \frac{(-i)^{\delta_{k_1,i+1}}(-j)^{\delta_{k_2,j+1}}(-i')^{\delta_{k_1,i'+1}}(-j')^{\delta_{k_2,j'+1}}}{ijj'j'}.$$

Como  $i < i', j < j'$  temos que  $\delta_{k_1,i'+1} = \delta_{k_2,j'+1} = 0$  para todo  $k_1$  e  $k_2$  dentro do somatório anterior, ou seja,

$$\langle w_{i,j}|w_{i',j'}\rangle = \frac{\sqrt{h_{i,j}h_{i',j'}}}{i'j'} \sum_{k_1,k_2=1}^{i+1,j+1} \frac{(-i)^{\delta_{k_1,i+1}}(-j)^{\delta_{k_2,j+1}}}{ij}.$$

Note que abrindo o somatório anterior obtemos

$$\begin{aligned} &\sum_{k_1,k_2=1}^{i+1,j+1} \frac{(-i)^{\delta_{k_1,i+1}}(-j)^{\delta_{k_2,j+1}}}{ij} = \\ &\frac{(-i)^{\delta_{i+1,i+1}}(-j)^{\delta_{j+1,j+1}}}{ij} + \sum_{k_1=1}^i \frac{(-i)^{\delta_{k_1,i+1}}(-j)^{\delta_{j+1,j+1}}}{ij} + \\ &+ \sum_{k_2=1}^j \frac{(-i)^{\delta_{i+1,i+1}}(-j)^{\delta_{k_2,j+1}}}{ij} + \sum_{k_1,k_2=1}^{i,j} \frac{(-i)^{\delta_{k_1,i+1}}(-j)^{\delta_{k_2,j+1}}}{ij} = \\ &1 - \sum_{k_1=1}^i \frac{1}{i} - \sum_{k_1=1}^j \frac{1}{j} + \sum_{k_1,k_2=1}^{i,j} \frac{1}{ij} = 1 - 1 - 1 + 1 = 0. \end{aligned}$$

Portanto neste caso os vetores são ortogonais.

Caso 2 ( $i < i', j = j'$ ): Neste caso a equação é simplificada para

$$\langle w_{i,j}|w_{i',j'}\rangle = \sqrt{h_{i,j}}\sqrt{h_{i',j'}} \sum_{k_1,k_2=1}^{i+1,j+1} \frac{(-i)^{\delta_{k_1,i+1}}(-j)^{\delta_{k_2,j+1}}(-i')^{\delta_{k_1,i'+1}}(-j')^{\delta_{k_2,j'+1}}}{ijj'j'}.$$

Como  $i < i'$  e  $j = j'$  temos que

$$\langle w_{i,j} | w_{i',j'} \rangle = \frac{\sqrt{h_{i,j} h_{i',j'}}}{i'} \sum_{k_1, k_2=1}^{i+1, j+1} \frac{(-i)^{\delta_{k_1, i+1}} (j^2)^{\delta_{k_2, j+1}}}{ij^2}.$$

Abrindo o somatório anterior obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{k_1, k_2=1}^{i+1, j+1} \frac{(-i)^{\delta_{k_1, i+1}} (j^2)^{\delta_{k_2, j+1}}}{ij^2} &= \frac{(-i)^{\delta_{i+1, i+1}} (j^2)^{\delta_{j+1, j+1}}}{ij^2} + \sum_{k_1=1}^i \frac{(-i)^{\delta_{k_1, i+1}} (j^2)^{\delta_{j+1, j+1}}}{ij^2} + \\ &+ \sum_{k_2=1}^j \frac{(-i)^{\delta_{i+1, i+1}} (j^2)^{\delta_{k_2, j+1}}}{ij^2} + \sum_{k_1, k_2=1}^{i, j} \frac{(-i)^{\delta_{k_1, i+1}} (j^2)^{\delta_{k_2, j+1}}}{ij^2} = \\ &-1 + \sum_{k_1=1}^i \frac{1}{i} - \sum_{k_1=1}^j \frac{1}{j^2} + \sum_{k_1, k_2=1}^{i, j} \frac{1}{ij^2} = -1 + 1 - \frac{1}{j} + \frac{1}{j} = 0. \end{aligned}$$

Portanto neste caso também temos vetores ortogonais.

Caso 3 ( $i = i', j = j'$ ): Neste último caso estamos interessados em verificar que a norma dos vetores dessa base é 1. De fato neste caso a equação simplifica para

$$\langle w_{i,j} | w_{i',j'} \rangle = \sqrt{h_{i,j}} \sqrt{h_{i',j'}} \sum_{k_1, k_2=1}^{i+1, j+1} \frac{(-i)^{\delta_{k_1, i+1}} (-j)^{\delta_{k_2, j+1}} (-i')^{\delta_{k_1, i'+1}} (-j')^{\delta_{k_2, j'+1}}}{ij'j'}.$$

Como  $i = i'$  e  $j = j'$  temos que a equação é simplificada para

$$\langle w_{i,j} | w_{i',j'} \rangle = h_{i,j} \sum_{k_1, k_2=1}^{i+1, j+1} \frac{(i^2)^{\delta_{k_1, i+1}} (j^2)^{\delta_{k_2, j+1}}}{i^2 j^2}.$$

Abrindo o somatório da última equação obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{k_1, k_2=1}^{i+1, j+1} \frac{(i^2)^{\delta_{k_1, i+1}} (j^2)^{\delta_{k_2, j+1}}}{i^2 j^2} &= \frac{(i^2)^{\delta_{i+1, i+1}} (j^2)^{\delta_{j+1, j+1}}}{i^2 j^2} + \sum_{k_1=1}^i \frac{(i^2)^{\delta_{k_1, i+1}} (j^2)^{\delta_{j+1, j+1}}}{i^2 j^2} + \\ &+ \sum_{k_2=1}^j \frac{(i^2)^{\delta_{i+1, i+1}} (j^2)^{\delta_{k_2, j+1}}}{i^2 j^2} + \sum_{k_1, k_2=1}^{i, j} \frac{(i^2)^{\delta_{k_1, i+1}} (j^2)^{\delta_{k_2, j+1}}}{i^2 j^2} = \\ &1 + \sum_{k_1=1}^i \frac{1}{i^2} + \sum_{k_1=1}^j \frac{1}{j^2} + \sum_{k_1, k_2=1}^{i, j} \frac{1}{i^2 j^2} = 1 + \frac{1}{i} + \frac{1}{j} + \frac{1}{ij} = \frac{1}{h_{i,j}}. \end{aligned}$$

Portanto  $|w_{i,j}\rangle$  tem norma 1 para qualquer  $i$  e  $j$ .

□

Como temos os autovalores e autovetores de  $A_{K_{n,n}}$  e também uma base ortonormal do núcleo de  $R_{K_{n,n}}$  podemos através do [Teorema 3.1](#) encontrar os autovetores e autovalores do grafo total  $T(K_{n,n})$ . Para encontrar esta decomposição espectral observe primeiramente

que  $R_{K_{n,n}}^T |v_n\rangle$ ,  $R_{K_{n,n}}^T |v_k\rangle$  e  $R_{K_{n,n}}^T |v_{k'}\rangle$ , com  $k \in \{1, \dots, n-1\}$ , são dados por

$$R_{K_{n,n}}^T |v_n\rangle = \frac{2}{\sqrt{2n}} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |e_{i,j}\rangle \quad (4.27)$$

$$R_{K_{n,n}}^T |v_k\rangle = \sqrt{\frac{k}{k+1}} \left( \sum_{j=1}^n |e_{k+1,j}\rangle - \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^n \frac{1}{k} |e_{i,j}\rangle \right) \quad (4.28)$$

$$R_{K_{n,n}}^T |v_{k'}\rangle = \sqrt{\frac{k}{k+1}} \left( \sum_{i=1}^n |e_{i,k+1}\rangle - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^k \frac{1}{k} |e_{i,j}\rangle \right) \quad (4.29)$$

Já as equações (4.30-4.35) fornecem uma base ortonormal de autovetores de  $T(K_{n,n})$  com os autovalores dados por  $2n, n-4, \theta_0^\pm, \theta_0^\pm, -n$  e  $-2$ , respectivamente.

$$|X_n^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{4+2n}} (2|v_n\rangle + R_{K_{n,n}}^T |v_n\rangle) \quad (4.30)$$

$$|X_n^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{n^2+2n}} \left( \sum_{i=1}^n |i\rangle + |i'\rangle + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |e_{i,j}\rangle \right)$$

onde  $A_{T(K_{n,n})} |X_n^+\rangle = 2n |X_n^+\rangle$ .

$$|X_n^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{n^2+6n+4}} ((-2-n)|v_n\rangle + R_{K_{n,n}}^T |v_n\rangle) \quad (4.31)$$

$$|X_n^-\rangle = \frac{-2-n}{\sqrt{2n}\sqrt{n^2+6n+4}} \sum_{i=1}^n |i\rangle + |i'\rangle + \frac{2}{\sqrt{2n}\sqrt{n^2+6n+4}} \sum_{i=1}^n \sum_{i=1}^n |e_{i,j}\rangle$$

onde  $A_{T(K_{n,n})} |X_n^-\rangle = (n-4) |X_n^-\rangle$ .

Temos que os autovalores de  $T(K_{n,n})$  associados ao autovalor 0 de  $K_{n,n}$  são dados por

$$\theta_0^\pm = \frac{n-2 \pm \sqrt{n^2+4}}{2}$$

$$\text{Sejam } \Delta_n^\pm = \frac{n^2+4 \pm (2-n)\sqrt{n^2+4}}{2} \text{ e } \alpha_n^\pm = \frac{2-n \pm \sqrt{n^2+4}}{2}.$$

$$|X_{0,k}^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta_n^\pm}} (\alpha_n^\pm |v_k\rangle + R_{K_{n,n}}^T |v_k\rangle), \quad (4.32)$$

onde  $A_{T(K_{n,n})} |X_{0,k}^\pm\rangle = \theta_0^\pm |X_{0,k}^\pm\rangle$  para  $k \in \{1, \dots, n-1\}$ .

$$|X_{0,k'}^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta_n^\pm}} (\alpha_n^\pm |v_{k'}\rangle + R_{K_{n,n}}^T |v_{k'}\rangle), \quad (4.33)$$

onde  $A_{T(K_{n,n})}|X_{0,k'}^\pm\rangle = \theta_0^\pm |X_{0,k'}^\pm\rangle$  para  $k \in \{1, \dots, n-1\}$ .

$$|Z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left( \sum_{i=1}^n |i\rangle - |i'\rangle \right), \quad (4.34)$$

onde  $A_{T(K_{n,n})}|Z\rangle = -n|Z\rangle$ .

$$|Y_{i,j}\rangle = |w_{i,j}\rangle, \quad (4.35)$$

onde  $A_{T(K_{n,n})}|Y_{i,j}\rangle = -2|Y_{i,j}\rangle$  para  $i, j \in \{1, \dots, n-1\}$ .

Substituindo a Equação 4.30 até a Equação 4.35 na Equação 4.7 e (Equação 4.8) com  $q = 5$ , obtemos

$$S_1^v = \frac{1}{2n} + \frac{5}{12n^2} + O\left(\frac{1}{n^3}\right), \quad (4.36)$$

$$S_1^e = \frac{1}{2n} + \frac{1}{2n^2} + O\left(\frac{1}{n^3}\right),$$

e

$$S_2^v = S_2^e = \frac{1}{4n^2} + O\left(\frac{1}{n^3}\right). \quad (4.37)$$

Usando (4.10), obtemos

$$\epsilon^v = \left(1 - \frac{7}{9n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right)\right) \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (4.38)$$

e

$$\epsilon^e = \left(1 - \frac{1}{n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right)\right) \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (4.39)$$

Usando (Equação 4.13), o tempo ótimo nos dois casos é

$$t_{\text{run}} = \frac{\pi\sqrt{N}}{2} \quad (4.40)$$

e usando (4.14), a probabilidade de sucesso de achar um vértice marcado é

$$p_{\text{succ}}^v = 1 - \frac{14}{9n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right) \quad (4.41)$$

e a de achar uma aresta é

$$p_{\text{succ}}^e = 1 - \frac{2}{n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \quad (4.42)$$

A diferença entre buscar um vértice ou uma aresta só pode ser vista no termo de primeira ordem.

Na Figura 5 e na Figura 6 temos representadas  $p_v(t)$  e  $p_e(t)$ , respectivamente calculadas de forma numérica (em vermelho) e analítica (em azul) para  $n = 100$ .

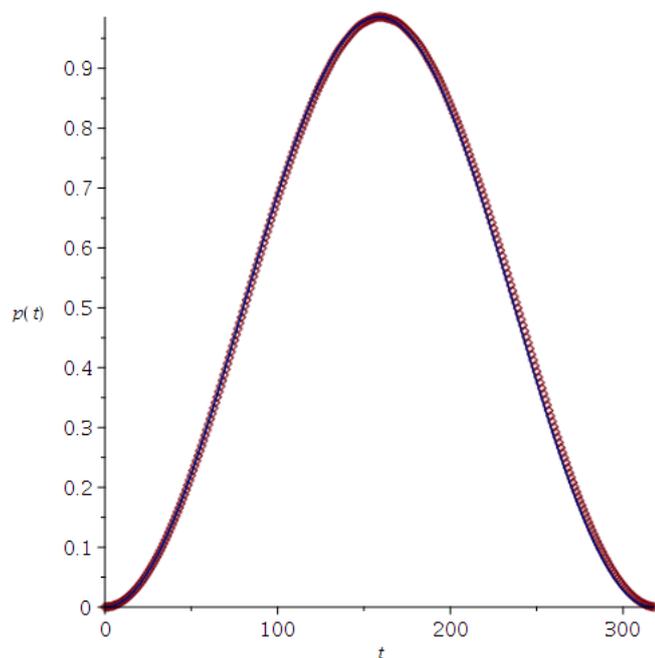


Figura 5 – A curva contínua em azul é  $p_v(t)$  para  $n = 100$  e os pontos vermelhos são simulações numéricas.

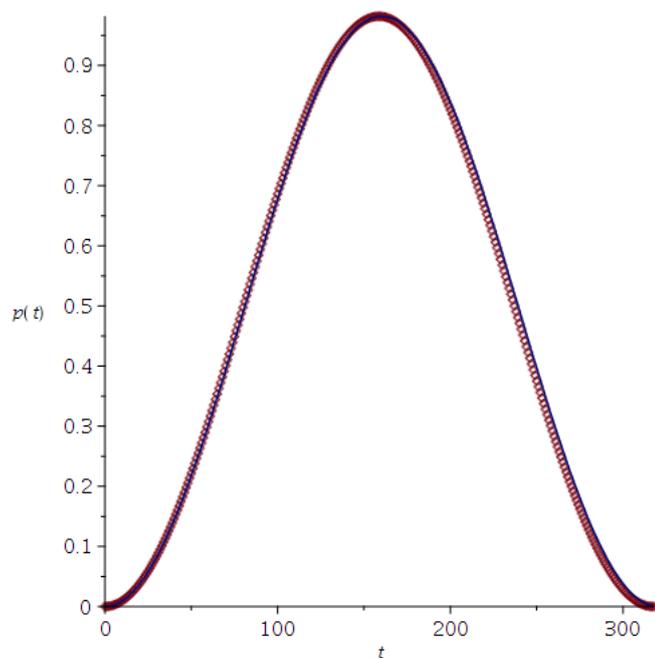


Figura 6 – A curva contínua em azul é  $p_e(t)$  para  $n = 100$  e os pontos vermelhos são simulações numéricas.

### 4.3.1 Verificação numérica das hipóteses

Ao longo da [seção 4.1](#) descrevemos um método para encontrar a complexidade computacional e a probabilidade de sucesso de um algoritmo de busca espacial quântica em um grafo. Para o método funcionar são feitas três hipóteses. Essas hipóteses envolvem os autovalores e autovetores do Hamiltoniano modificado do grafo a ser analisado. No nosso caso o grafo em questão é o grafo total do grafo bipartido completo, ou seja,  $T(K_{n,n})$ .

Nesta subseção mostraremos, através de experimentos numéricos, que assintoticamente as hipóteses são válidas no caso do grafo total do grafo bipartido completo. Para tais análises utilizamos o python e seus pacotes networkx (para trabalhar com a parte de teoria de grafos), scipy (para lidar com matrizes esparsas) e numpy. Com o networkx obtemos o grafo bipartido completo e seu grafo linha e através deles construímos a matriz de blocos que é a matriz de adjacência do grafo total. Com essa matriz em mãos podemos modifica-la no elemento marcado, mantendo a matriz esparsa. Utilizando o comando eigh obtemos os autovalores e autovetores da matriz modificada.

O nosso estudo se baseou em três hipóteses, listadas a seguir:

- O estado fundamental e o primeiro estado excitado tem, como autovalores, valores simetricamente próximos de  $-\gamma^i \phi_0$ , com a diferença tendendo a zero;
- Os únicos autovalores que desempenham papel relevante no cálculo da probabilidade de sucesso são os do estado fundamental e do primeiro estado excitado;
- O produto dos brakets a seguir são simétricos em relação à origem,  $\langle \lambda^+ | \psi(0) \rangle \langle w | \lambda^+ \rangle = -\langle \lambda^- | \psi(0) \rangle \langle w | \lambda^- \rangle + o(1)$ .

Na [Figura 7](#) e na [Figura 8](#) vemos que, respectivamente,  $\epsilon^v$  e  $\epsilon^e$  tendem assintoticamente para 0. Nessas figuras temos que  $\epsilon^i$  é representado de forma numérica (em vermelho) e de forma analítica (em preto). A forma analítica vem da [Equação 4.38](#) e da [Equação 4.39](#) e a forma numérica vem do fato que  $\epsilon$  é igual à metade do gap espectral.

Para verificar a primeira hipótese note que existem duas afirmações a serem verificadas. Como vemos na [Figura 9](#) e na [Figura 10](#) numericamente a diferença de  $\lambda^+$  e de  $\lambda^-$  para  $-2n\gamma$  tende a zero e, além disso, apresentam uma simetria entre si.

A segunda hipótese é verificada pela [Figura 11](#) e pela [Figura 12](#) que mostram que numericamente o produto  $\langle \lambda^+ | \psi(0) \rangle \langle w | \lambda^+ \rangle$  tende para 0, 5 e desta forma pela [Equação 4.12](#) vemos que os autovalores  $\lambda^+$  e  $\lambda^-$  que tem maior influência no cálculo da probabilidade. A terceira hipótese é verificada pela [Figura 11](#) e pela [Figura 12](#) que mostram numericamente que  $\langle \lambda^+ | \psi(0) \rangle \langle w | \lambda^+ \rangle = -\langle \lambda^- | \psi(0) \rangle \langle w | \lambda^- \rangle + o(1)$ .

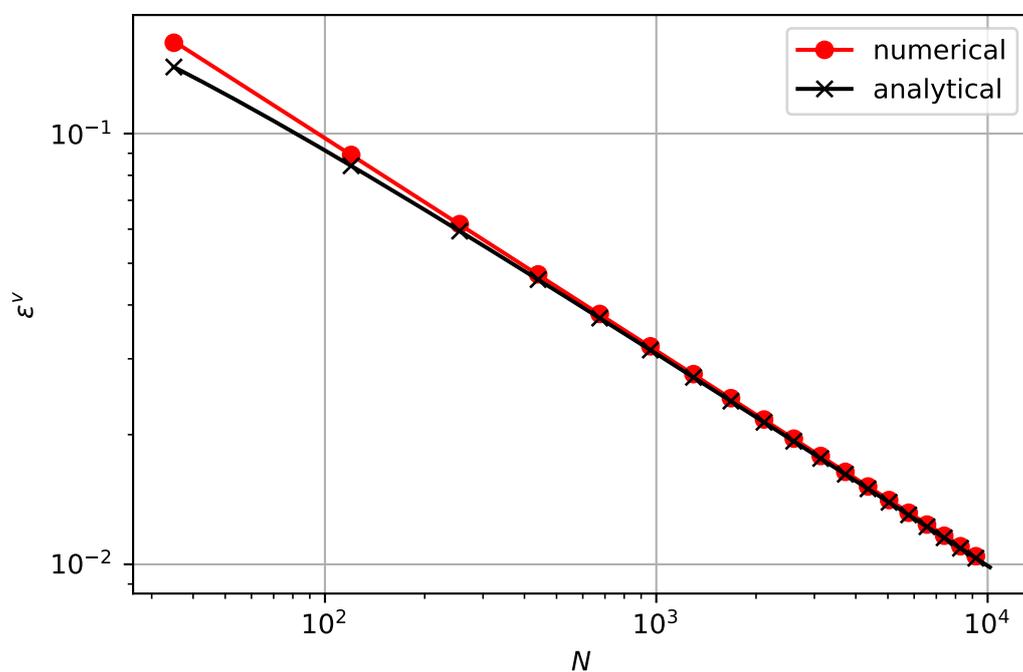


Figura 7 – Os pontos em vermelho são  $\epsilon^v$  calculado numericamente e a reta em vermelho é obtida de um fitting com  $f(x) \approx -0.49x - 0.055$ . Os x's em preto são  $\epsilon^v$  calculado analiticamente com  $g(x) = \left(1 - \frac{7}{9n}\right) \frac{1}{\sqrt{N}}$ .

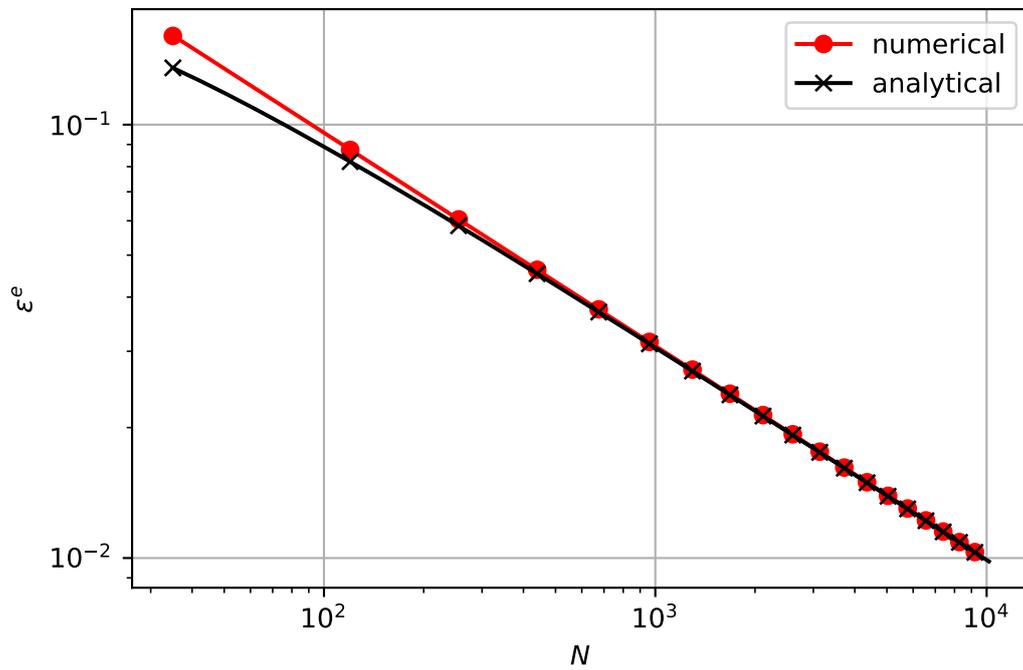


Figura 8 – Os pontos em vermelho são  $\epsilon^v$  calculado numericamente e a reta em vermelho é obtida de um fitting com  $f(x) \approx -0.49x - 0.079$ . Os x's em preto são  $\epsilon^v$  calculado analiticamente com  $g(x) = \left(1 - \frac{1}{n}\right) \frac{1}{\sqrt{N}}$ .

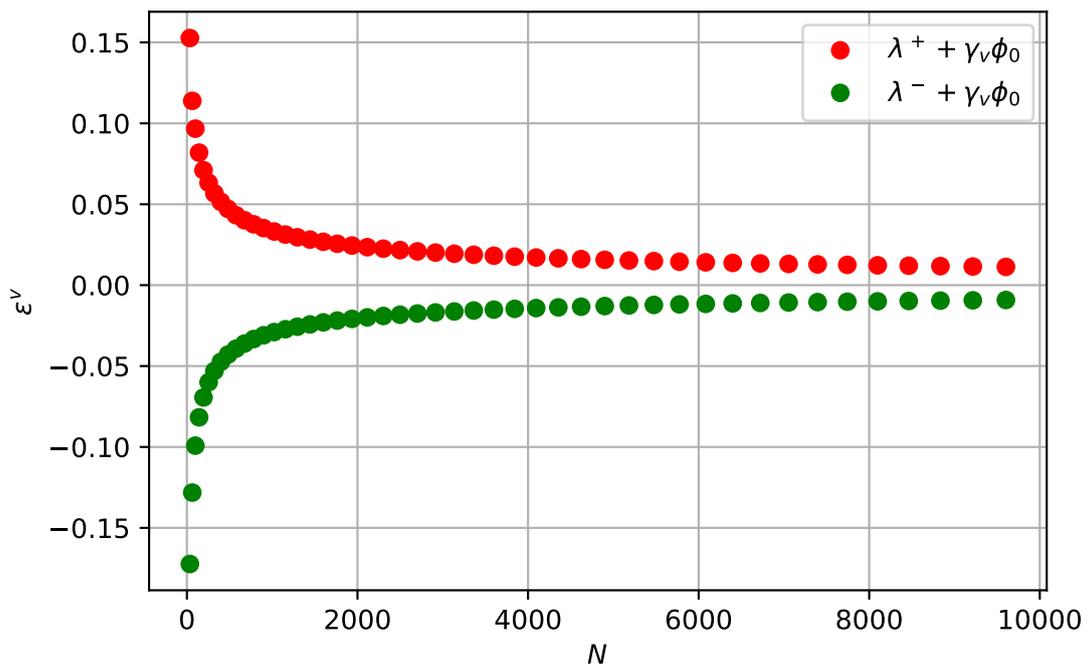


Figura 9 – Como  $\lambda_v^\pm = -\gamma_v \phi_0 \pm \epsilon^v$  verificamos que  $\epsilon^v$  tende para 0.

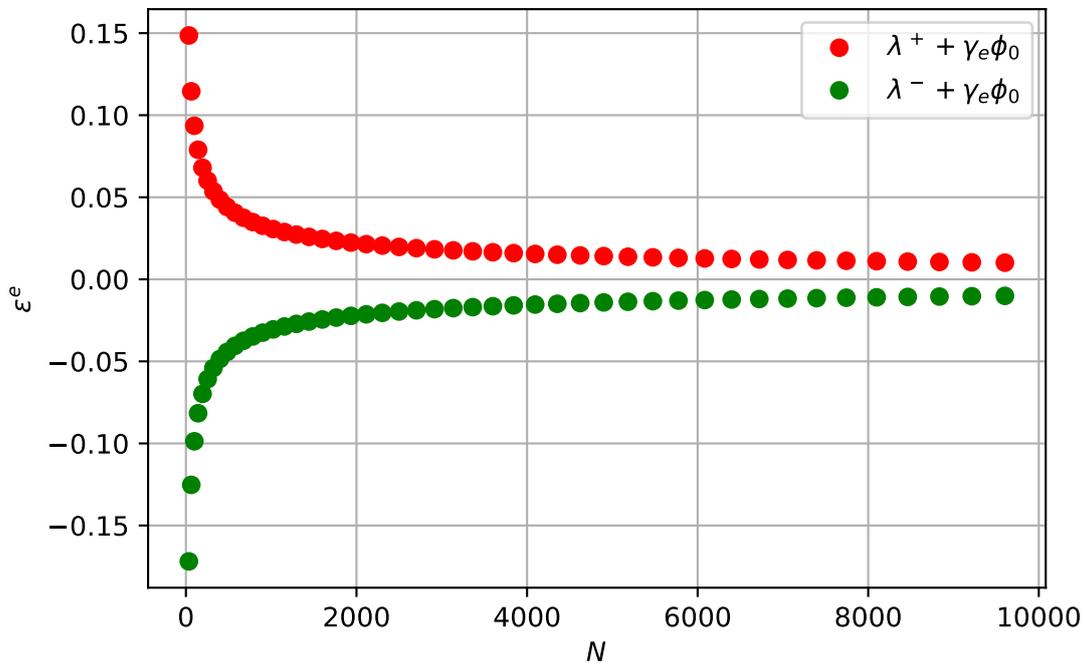


Figura 10 – Como  $\lambda_e^\pm = -\gamma_e \phi_0 \pm \epsilon_e$  verificamos que  $\epsilon_e$  tende para 0.

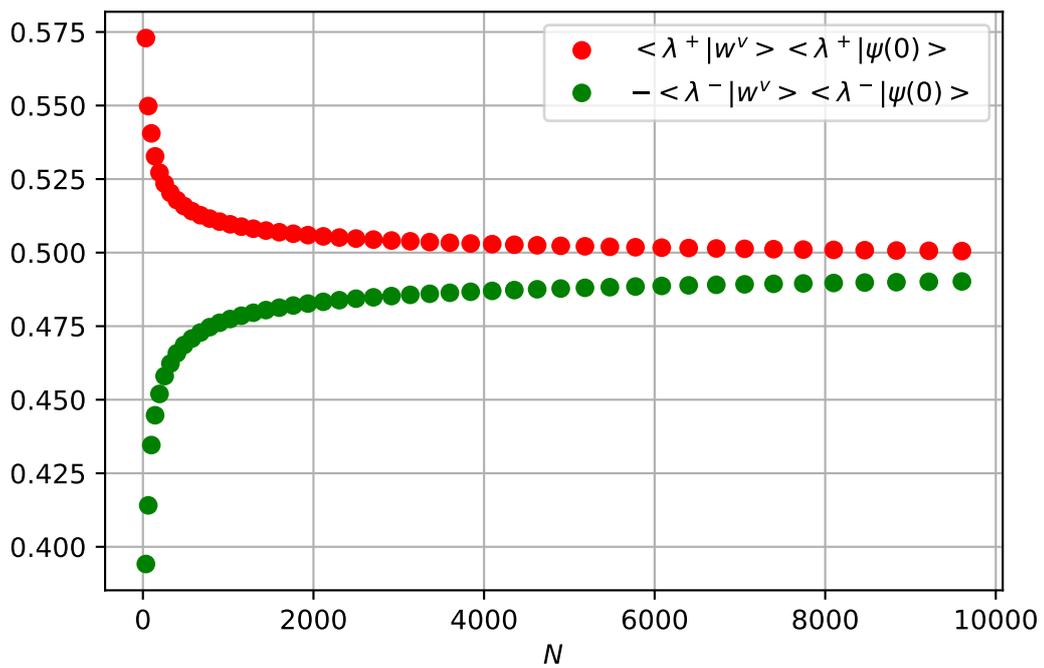


Figura 11 – A figura sugere que assintoticamente os produtos tendem a se igualar.

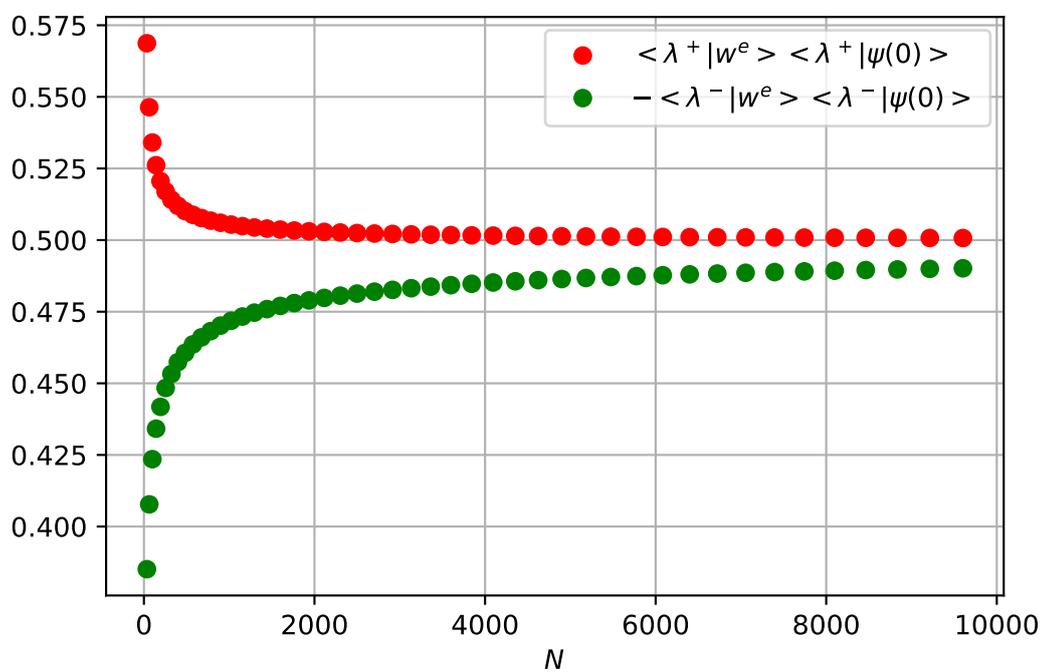


Figura 12 – A figura sugere que assintoticamente os produtos tendem a se igualar.

## 5 Andando em vértices e arestas usando o passeio quântico escalonado

O modelo escalonado faz uso do tempo discreto. Para definir o modelo de passeio quântico escalonado é necessário definir o conceito de tesselação de um grafo.

**Definição 5.1.** Uma **tesselação** de um grafo é uma partição dos vértices de um grafo, de tal forma que cada elemento da partição é uma clique. Um elemento da partição é chamado de **polígono**.

Essa definição anterior nos fornece a definição de uma tesselação de um grafo. Veremos mais adiante que para maioria dos grafos uma única tesselação não é suficiente para definir um passeio quântico escalonado, por este motivo surge a seguinte definição.

**Definição 5.2.** Dizemos que uma aresta  $uv$  é **coberta** por uma tesselação  $\mathcal{T}$  se seus vértices  $u$  e  $v$  pertencem a um mesmo polígono da tesselação  $\mathcal{T}$ . Um conjunto de  $k$  tesselações que cobrem todas as arestas de  $G$  é dito uma **cobertura de tesselações** de  $G$ , neste caso dizemos que  $G$  é  **$k$ -tesselável**.

Para poder definir um passeio quântico escalonado em um grafo  $\Gamma$  devemos definir tesselações em  $\Gamma$  até que todas suas arestas estejam cobertas. Sejam  $\Gamma$  um grafo  $k$ -tesselável e  $\mathcal{T}_1, \dots, \mathcal{T}_k$  tesselações que juntas cobrem todas as arestas de  $\Gamma$ . O espaço de Hilbert onde o passeio desenvolve sua dinâmica é dado por  $\mathcal{H}^{|\Gamma|}$ , com cada vértice de  $\Gamma$  associado com um vetor da base computacional. Para cada polígono de  $\mathcal{T}_i = \{\alpha_i^1, \dots, \alpha_i^{|\mathcal{T}_i|}\}$  vamos definir um vetor

$$|\alpha_i^j\rangle = \sum_{v \in \alpha_i^j} a_{i,v} |v\rangle,$$

onde  $a_{i,v} \in \mathbb{C}$  é a amplitude não nula do vetor unitário  $|\alpha_i^j\rangle$ . Para cada tesselação  $\mathcal{T}_i$  vamos definir um operador local  $H_i$  que é uma reflexão ortogonal definida por

$$H_i = 2 \sum_{j=1}^{|\mathcal{T}_i|} |\alpha_i^j\rangle \langle \alpha_i^j| - I.$$

Observe que tal operador faz uma partícula localizada em um vértice  $v$  se espalhar pelos vértices do polígono da tesselação  $\mathcal{T}_i$  que contém  $v$ .

Finalmente definimos o operador de evolução do passeio quântico escalonado como sendo

$$U = e^{i\theta_k H_k} \dots e^{i\theta_2 H_2} e^{i\theta_1 H_1},$$

onde  $0 \leq \theta_i \leq \pi/2$ .

## 5.1 Passeio quântico escalonado total

Um novo modelo de passeios quânticos foi proposto por Abreu et al. (ABREU et al., 2020). Nesse novo modelo a partícula pode estar localizada tanto nas arestas como nos vértices do grafo. O modelo de passeio quântico escalonado total usa o conceito de tesselação total de um grafo.

**Definição 5.3.** Sejam  $G = (V, E)$  um grafo e  $\Omega$  um conjunto de labels. Uma **tesselação total** de um grafo é uma coloração própria de  $V$  e uma cobertura de tesselações de  $G$ , ambas usando os labels de  $\Omega$ , de tal forma que se uma aresta  $uv$  é coberta pela tesselação  $i \in \Omega$  então vale que a cor de  $u$  e  $v$  não é  $i$ .

Seja  $\Gamma$  um grafo com uma tesselação total com labels em  $\Omega$ . Assim como no modelo escalonado vamos definir operadores locais  $H_i$  que são reflexões ortogonais para cada  $i \in \Omega$ . Como queremos que a partícula possa estar localizada em vértices e arestas vamos definir 4 regras para como a partícula se movimenta para cada aplicação de  $H_i$ .

1. Se a partícula se encontra em um vértice  $v$  e o polígono da tesselação  $\mathcal{T}_i$  que contém  $v$  tem tamanho 1, dividimos em dois casos:
  - (i) se a cor do vértice  $v$  é  $i$  então a partícula se espalha em todas as arestas incidentes a  $v$  e permanece em  $v$ ;
  - (ii) se a cor do vértice  $v$  é diferente de  $i$  então a partícula não se move.
2. Se a partícula se encontra em um vértice  $v$  e o polígono da tesselação  $\mathcal{T}_i$  que contém  $v$  tem tamanho maior ou igual a 2, temos dois casos:
  - (i) se o polígono tem tamanho 2 a partícula se espalha por todos os vértices do polígono e pela aresta coberta pelo polígono;
  - (ii) se o polígono é estritamente maior que 2 a partícula se espalha por todos os vértices do polígono.
3. Se a partícula se encontra em uma aresta  $uv$  que não é coberta pela tesselação  $\mathcal{T}_i$ , temos dois casos:
  - (i) se  $u$  ou  $v$  tem a cor  $i$ , digamos  $u$ , então a partícula se espalha em  $u$  e por todas as arestas incidentes a  $u$ ;
  - (ii) se  $u$  e  $v$  também não têm a cor  $i$  a partícula permanece parada.

4. Se a partícula se encontra em uma aresta  $uv$  coberta pela tesselação  $\mathcal{T}_i$ , temos dois casos:

(i) se o polígono de  $\mathcal{T}_i$  que cobre  $uv$  tem tamanho 2 a partícula se espalha pelos vértices  $u$  e  $v$  e permanece em  $uv$ ;

(ii) se o polígono de  $\mathcal{T}_i$  que cobre  $uv$  tem tamanho estritamente maior que 2 a partícula fica parada.

Descrevamos então formalmente o operador  $H_j$  associado com uma tesselação  $\mathcal{T}_j$ . Suponhamos  $\mathcal{T}_j = \{c_j^1, \dots, c_j^{|\mathcal{T}_j|}\}$ , onde  $c_j^l$  é um polígono de  $\mathcal{T}_j$ . Definimos os vetores  $|\alpha_j^l\rangle$  e  $|\beta_j^{l,k}\rangle$ , ambos em  $\mathcal{H}^{n+m}$ , como

$$|\alpha_j^l\rangle = \begin{cases} \cos \frac{\lambda_{j,l}}{2} |v\rangle + \frac{\sin \frac{\lambda_{j,l}}{2}}{\sqrt{|N(v)|}} \sum_{w \in N(v)} |vw\rangle, & \text{se } c_j^l = \{v\} \text{ e } \text{cor}(v) = j \\ |v\rangle, & \text{se } c_j^l = \{v\} \text{ e } \text{cor}(v) \neq j \\ \cos \frac{\lambda_{j,l}}{2} \left( \frac{|v\rangle + |w\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \sin \frac{\lambda_{j,l}}{2} |vw\rangle, & \text{se } c_j^l = \{v, w\} \\ \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{v \in c_j^l} |v\rangle, & \text{se } |c_j^l| = m > 2, \end{cases}$$

e

$$|\beta_j^{l,k}\rangle = \begin{cases} |vw\rangle, & \text{se } |c_j^l| > 2, \text{ com } vw \text{ sendo a } k\text{-ésima aresta de } c_j^l \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

que são associados com o  $l$ -ésimo polígono de  $\mathcal{T}_j$  e a  $k$ -ésima aresta do  $l$ -ésimo polígono de  $\mathcal{T}_j$ , respectivamente. O parâmetro  $0 \leq \lambda_{j,l} \leq \pi$  é um ângulo que funciona como um peso que aumenta a importância dos vértices para  $\lambda_{j,l}$  próximo de 0 ou das arestas se  $\lambda_{j,l}$  está próximo de  $\pi$ . Vetores  $|\alpha_j^l\rangle$  são usados para implementar as regras 1, 2, 3(i) e 4(i), os vetores  $|\beta_j^{l,k}\rangle$  para implementar a regra 4(ii). Além disso, eles obedecem à condição de ortonormalidade  $\langle \alpha_j^l | \alpha_j^{l'} \rangle = \delta_{ll'}$ ,  $\langle \beta_j^{l,k} | \beta_j^{l',k'} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{kk'}$ , e  $\langle \alpha_j^l | \beta_j^{l',k} \rangle = 0$ , onde  $\delta_{ll'}$  e  $\delta_{kk'}$  são o delta de Kronecker. O operador  $H_j$  associado com a tesselação  $\mathcal{T}_j$  é definido como

$$H_j = 2 \left[ \sum_{l=1}^{|\mathcal{T}_j|} \left( |\alpha_j^l\rangle \langle \alpha_j^l| + \sum_{k=1}^{|E(c_j^l)|} |\beta_j^{l,k}\rangle \langle \beta_j^{l,k}| \right) + \sum_{e_j^p \in \mathcal{N}_j} |e_j^p\rangle \langle e_j^p| \right] - I,$$

onde  $\mathcal{N}_j = \{e_j^1, \dots, e_j^{|\mathcal{N}_j|}\}$  é o conjunto de todas as arestas de  $G$  que não são cobertas por  $\mathcal{T}_j$  e não são incidentes a vértices de cor  $j$ . Esse último conjunto é responsável por implementar a regra 3(ii).

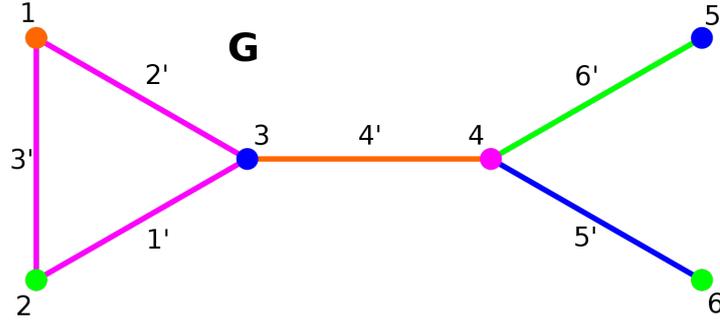


Figura 13 – Grafo  $G$  e uma total tesselação utilizando 4 cores (polígonos de tamanho 1 não estão representados).

Assim como no modelo escalonado padrão o operador de evolução é definido por

$$U = e^{i\theta_k H_k} \dots e^{i\theta_2 H_2} e^{i\theta_1 H_1},$$

onde  $0 \leq \theta_i \leq \pi/2$ .

Veremos agora um exemplo de um passeio quântico escalonado total no grafo  $G$  da figura 13, onde a total tesselação está descrita de tal forma que os polígonos são representados pelas arestas coloridas e os polígonos de tamanho 1 são omitidos. Por exemplo, a tesselação azul é dada por  $\mathcal{T}_B = \{\{1\}, \{2\}, \{3\}, \{4, 6\}, \{5\}\}$ . Com a tesselação azul podemos definir os vetores que implementarão  $H_B$ , são eles:

$$\begin{aligned} |\alpha_B^1\rangle &= |1\rangle, \\ |\alpha_B^2\rangle &= |2\rangle, \\ |\alpha_B^3\rangle &= \cos \frac{\lambda}{2} |3\rangle + \operatorname{sen} \frac{\lambda}{2} \left( \frac{|1'\rangle + |2'\rangle + |4'\rangle}{\sqrt{3}} \right), \\ |\alpha_B^4\rangle &= \cos \frac{\lambda}{2} \left( \frac{|4\rangle + |6\rangle}{\sqrt{2}} \right) + \operatorname{sen} \frac{\lambda}{2} |5'\rangle, \\ |\alpha_B^5\rangle &= \cos \frac{\lambda}{2} |5\rangle + \operatorname{sen} \frac{\lambda}{2} |6'\rangle, \\ |e_B^1\rangle &= |3'\rangle. \end{aligned}$$

Com estes vetores definimos o operador local

$$H_B = \left( 2 \sum_{l=1}^5 |\alpha_B^l\rangle \langle \alpha_B^l| \right) + 2 |e_B^1\rangle \langle e_B^1| - I,$$

representado na matriz abaixo. Observe que os vetores  $|\alpha_B^1\rangle$  e  $|\alpha_B^2\rangle$  implementam a regra 1.(ii), os vetores  $|\alpha_B^3\rangle$  e  $|\alpha_B^5\rangle$  as regras 1.(i) e 3.(i), o vetor  $|\alpha_B^4\rangle$  as regras 2.(i) e 4.(i) e o vetor  $|e_B^1\rangle$  a regra 3.(ii). Os operadores  $H_G$  e  $H_O$  são encontrados da mesma forma.

Para encontrar o operador  $H_P$  observamos que a tesselação rosa é dada por  $\mathcal{T}_P = \{\{1, 2, 3\}, \{4\}, \{5\}, \{6\}\}$ . Desta forma os vetores que implementarão  $H_P$  são:

$$\begin{aligned} |\alpha_P^1\rangle &= \frac{|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle}{\sqrt{3}}, \\ |\alpha_P^2\rangle &= \cos \frac{\lambda}{2} |4\rangle + \operatorname{sen} \frac{\lambda}{2} \left( \frac{|4'\rangle + |5'\rangle + |6'\rangle}{\sqrt{3}} \right), \\ |\alpha_P^3\rangle &= |5\rangle \\ |\alpha_P^4\rangle &= |6\rangle, \\ |\beta_P^{1,1}\rangle &= |1'\rangle, \\ |\beta_P^{1,2}\rangle &= |2'\rangle, \\ |\beta_P^{1,3}\rangle &= |3'\rangle. \end{aligned}$$

Com estes vetores definimos o operador local

$$H_P = 2 \left[ \sum_{l=1}^4 \left( |\alpha_P^l\rangle \langle \alpha_P^l| + \sum_{k=1}^{|E(c_j^l)|} |\beta_P^{l,k}\rangle \langle \beta_P^{l,k}| \right) \right] - I,$$

representado na matriz abaixo. Observe que o vetor  $|\alpha_P^1\rangle$  implementa a regra 2.(ii), o vetor  $|\alpha_P^2\rangle$  as regras 1.(i) e 3(i), os vetores  $|\alpha_P^3\rangle$  e  $|\alpha_P^4\rangle$  a regra 1.(ii) e os vetores  $|\beta_P^{1,1}\rangle$ ,  $|\beta_P^{1,2}\rangle$  e  $|\beta_P^{1,3}\rangle$  a regra 4.(ii).

Dessa forma temos que os operadores locais são dados por:

$$H_B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \lambda & 0 & 0 & 0 & \frac{\operatorname{sen} \lambda}{\sqrt{3}} & \frac{\operatorname{sen} \lambda}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{\operatorname{sen} \lambda}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\operatorname{sen} \lambda}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cos \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \operatorname{sen} \lambda \\ 0 & 0 & 0 & b & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\operatorname{sen} \lambda}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\operatorname{sen} \lambda}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & c & d & 0 & d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\operatorname{sen} \lambda}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & d & c & 0 & d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\operatorname{sen} \lambda}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & d & d & 0 & c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\operatorname{sen} \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\operatorname{sen} \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\cos \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \operatorname{sen} \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\cos \lambda \end{bmatrix},$$

$$H_O = \begin{bmatrix} \cos \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -b & -a & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -a & -b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\cos \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$H_P = \begin{bmatrix} -1/3 & 2/3 & 2/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2/3 & -1/3 & 2/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2/3 & 2/3 & -1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{3}} & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{3}} & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & c & d & d \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & d & c & d \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & d & d & c \end{bmatrix},$$

$$H_G = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 & b & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cos \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & \text{sen } \lambda & 0 \\ 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & -b & 0 & -a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & -a & 0 & -b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \text{sen } \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & -\cos \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & \frac{\text{sen } \lambda}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\cos \lambda \end{bmatrix},$$

onde  $a = \frac{\cos \lambda - 1}{2}$ ,  $b = \frac{\cos \lambda + 1}{2}$ ,  $c = -\frac{\cos \lambda + 2}{3}$  e  $d = -\frac{\cos \lambda - 1}{3}$ .

Dessa forma para  $\theta_B = \theta_G = \theta_P = \theta_O = \frac{\pi}{2}$  temos que o operador de evolução é dado por

$$U = H_B H_G H_P H_O.$$

## 5.2 Passeio quântico escalonado total na reta

Nesta seção mostraremos alguns resultados parciais no estudo de uma caminhada quântica escalonada total na reta, onde obtemos uma base de Fourier que pode ser utilizada na obtenção do desvio padrão de tal caminhada. Como o desvio padrão é dado por

$$\sigma(t) = \sqrt{\langle \hat{D}^2 \rangle_t - \langle \hat{D} \rangle_t^2},$$

onde  $\langle \hat{D}^n \rangle_t$  é o  $n$ -ésimo momento da distância no instante  $t$ , estamos interessados em procurar o primeiro e o segundo momento.

A figura 14 mostra o grafo  $G$ , que é a reta infinita, com uma total tesselação e o grafo total de  $G$ , denotado por  $T(G)$ , com a correspondente tesselação.

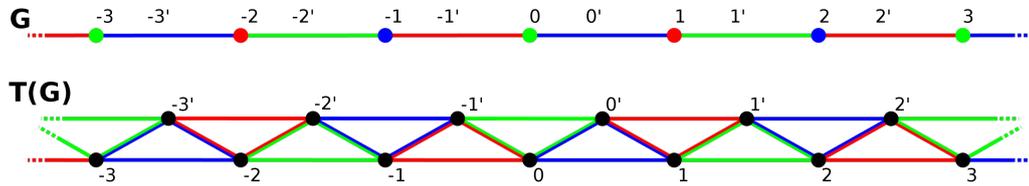


Figura 14 – Grafo  $G$  com uma total tesselação e o grafo total  $T(G)$  com a respectiva tesselação usual.

Temos que para realizar uma tesselação total que cubra todas as arestas da reta três cores são suficientes. Portanto, definiremos três operadores locais. Com tal objetivo definiremos os seguintes vetores

$$\begin{aligned} |\alpha_G^x\rangle &= \frac{|3x\rangle + |(3x-1)'\rangle + |(3x)'\rangle}{\sqrt{3}}, \\ |\alpha_G^{x'}\rangle &= \frac{|3x+1\rangle + |3x+2\rangle + |(3x+1)'\rangle}{\sqrt{3}}, \\ |\alpha_R^x\rangle &= \frac{|3x+1\rangle + |(3x)'\rangle + |(3x+1)'\rangle}{\sqrt{3}}, \\ |\alpha_R^{x'}\rangle &= \frac{|3x+2\rangle + |3x+3\rangle + |(3x+2)'\rangle}{\sqrt{3}}, \\ |\alpha_B^x\rangle &= \frac{|3x+2\rangle + |(3x+1)'\rangle + |(3x+2)'\rangle}{\sqrt{3}}, \\ |\alpha_B^{x'}\rangle &= \frac{|3x\rangle + |3x+1\rangle + |(3x)'\rangle}{\sqrt{3}}. \end{aligned}$$

Os operadores locais  $H_G$ ,  $H_R$  e  $H_B$  são definidos como

$$H_j = 2 \left( \sum_{x=-\infty}^{\infty} |\alpha_j^x\rangle \langle \alpha_j^x| + |\alpha_j^{x'}\rangle \langle \alpha_j^{x'}| \right) - I,$$

e com eles definimos o operador de evolução

$$U = e^{i\theta H_B} e^{i\theta H_R} e^{i\theta H_G}.$$

A simetria do grafo  $T(G)$  nos permite definir a seguinte base de Fourier escalonada quântica:

$$\begin{aligned} |\psi_k^0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{-ik3x} |3x\rangle + e^{-ik(3x+1,5)} |(3x+1)'\rangle, \\ |\psi_k^1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{-ik(3x+1)} |3x+1\rangle + e^{-ik(3x+2,5)} |(3x+2)'\rangle, \\ |\psi_k^2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{-ik(3x-1)} |3x-1\rangle + e^{-ik(3x+0,5)} |(3x)'\rangle. \end{aligned}$$

Os resultados a seguir serão importantes e são possíveis pela forma como a base de Fourier é definida.

**Proposição 5.1.** *Temos que os vetores da base de Fourier escalonada quântica  $\{|\psi_k^p\rangle; 0 \leq p \leq 2, k \in (-\pi, \pi)\}$  satisfazem  $\langle \psi_k^p | \psi_{k'}^{p'} \rangle = \delta_{pp'} \delta(k - k')$ .*

*Demonstração.* Primeiramente note que em  $|\psi_k^p\rangle$  e  $|\psi_{k'}^{p'}\rangle$ , com  $p$  e  $p'$  distintos, não apresentam vetores da base computacional em comum. Logo para  $p \neq p'$  vale que  $\langle \psi_k^p | \psi_{k'}^{p'} \rangle = 0$ .

Analisemos agora o que ocorre com  $\langle \psi_k^p | \psi_{k'}^{p'} \rangle$  quando  $p = p'$  e  $k \neq k'$ . Se  $p = 0$  temos que

$$\begin{aligned} \langle \psi_k^0 | \psi_{k'}^0 \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')3x} + e^{i(k-k')(3x+1,5)} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{x=-\infty}^{-1} e^{i(k-k')3x} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sum_1^{\infty} e^{i(k-k')3x} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{x=-\infty}^{-1} e^{i(k-k')(3x+1,5)} + \frac{e^{1,5i(k-k')}}{2} + \frac{1}{2} \sum_1^{\infty} e^{i(k-k')(3x+1,5)} \\ &\stackrel{k \neq k'}{=} \frac{1}{2(-1 + e^{3i(k-k')})} + \frac{1}{2} - \frac{e^{3i(k-k')}}{2(-1 + e^{3i(k-k')})} + \\ &+ \frac{e^{1,5i(k-k')}}{2(-1 + e^{3i(k-k')})} + \frac{e^{1,5i(k-k')}}{2} - \frac{e^{4,5i(k-k')}}{2(-1 + e^{3i(k-k')})} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Portanto para  $k \neq k'$  vale que  $\langle \psi_k^0 | \psi_{k'}^0 \rangle = 0$ . Mostrar que para  $k \neq k'$  vale que  $\langle \psi_k^1 | \psi_{k'}^1 \rangle = \langle \psi_k^2 | \psi_{k'}^2 \rangle = 0$  é análogo ao feito acima. Finalmente vemos que  $\langle \psi_k^p | \psi_{k'}^p \rangle$  resulta em uma soma infinita de 1's e consequentemente  $\langle \psi_k^p | \psi_{k'}^{p'} \rangle = \delta_{pp'} \delta(k - k')$ .  $\square$

**Proposição 5.2.** *Seja  $\Omega_k$  o hiperplano gerado por  $|\psi_k^0\rangle$ ,  $|\psi_k^1\rangle$  e  $|\psi_k^2\rangle$  para  $k$  fixo. Então  $\Omega_k$  é invariante por  $H_G$ ,  $H_R$  e  $H_B$ .*

*Demonstração.* Temos que

$$\begin{aligned}
 H_G|\psi_k^0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{-ik3x} \left( \frac{-1}{3}|3x\rangle + \frac{2}{3}|(3x-1)'\rangle + \frac{2}{3}|(3x)'\rangle \right) \\
 &+ e^{-ik(3x+1,5)} \left( \frac{-1}{3}|(3x+1)'\rangle + \frac{2}{3}|3x+1\rangle + \frac{2}{3}|3x+2\rangle \right) \\
 &= \frac{-1}{3\sqrt{2}} \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{-ik3x}|3x\rangle + e^{-ik(3x+1,5)}|(3x+1)'\rangle \\
 &+ \frac{2e^{ik/2}}{3\sqrt{2}} \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{-ik(3x+0,5)}|(3x)'\rangle + e^{-ik(3x+2)}|3x+2\rangle \\
 &+ \frac{2e^{-ik/2}}{3\sqrt{2}} \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{-ik(3x-0,5)}|(3x-1)'\rangle + e^{-ik(3x+1)}|3x+1\rangle \\
 &= \frac{-1}{3}|\psi_k^0\rangle + \frac{2e^{-ik/2}}{3}|\psi_k^1\rangle + \frac{2e^{ik/2}}{3}|\psi_k^2\rangle.
 \end{aligned}$$

De forma análoga obtemos

$$\begin{aligned}
 H_G|\psi_k^1\rangle &= \frac{2e^{ik/2}}{3}|\psi_k^0\rangle + \frac{-1}{3}|\psi_k^1\rangle + \frac{2e^{ik}}{3}|\psi_k^2\rangle, \\
 H_G|\psi_k^2\rangle &= \frac{2e^{-ik/2}}{3}|\psi_k^0\rangle + \frac{2e^{-ik}}{3}|\psi_k^1\rangle + \frac{-1}{3}|\psi_k^2\rangle, \\
 H_R|\psi_k^0\rangle &= \frac{-1}{3}|\psi_k^0\rangle + \frac{2e^{-ik/2}}{3}|\psi_k^1\rangle + \frac{2e^{-ik}}{3}|\psi_k^2\rangle, \\
 H_R|\psi_k^1\rangle &= \frac{2e^{ik/2}}{3}|\psi_k^0\rangle + \frac{-1}{3}|\psi_k^1\rangle + \frac{2e^{-ik/2}}{3}|\psi_k^2\rangle, \\
 H_R|\psi_k^2\rangle &= \frac{2e^{ik}}{3}|\psi_k^0\rangle + \frac{2e^{ik/2}}{3}|\psi_k^1\rangle + \frac{-1}{3}|\psi_k^2\rangle, \\
 H_B|\psi_k^0\rangle &= \frac{-1}{3}|\psi_k^0\rangle + \frac{2e^{ik}}{3}|\psi_k^1\rangle + \frac{2e^{ik/2}}{3}|\psi_k^2\rangle, \\
 H_B|\psi_k^1\rangle &= \frac{2e^{-ik}}{3}|\psi_k^0\rangle + \frac{-1}{3}|\psi_k^1\rangle + \frac{2e^{-ik/2}}{3}|\psi_k^2\rangle, \\
 H_B|\psi_k^2\rangle &= \frac{2e^{-ik/2}}{3}|\psi_k^0\rangle + \frac{2e^{ik/2}}{3}|\psi_k^1\rangle + \frac{-1}{3}|\psi_k^2\rangle.
 \end{aligned}$$

Logo  $\Omega_k$  é invariante por  $H_G$ ,  $H_R$  e  $H_B$ . □

Da proposição 5.2 podemos definir operadores  $H_i^k$  como sendo  $H_i$  restrito a  $\Omega_k$ , para  $i \in \{G, R, B\}$ . Com isso temos que

$$H_i|\psi_k^p\rangle = \sum_{p'=0}^2 \langle p'|H_i^k|p\rangle|\psi_k^{p'}\rangle.$$

Definimos  $U_k = e^{i\theta H_B^k} e^{i\theta H_R^k} e^{i\theta H_G^k}$ . Como  $(H_j^k)^2 = I$  vale que  $e^{i\theta H_j^k} = \cos\theta I + i \sin\theta H_j^k$ .

Logo vale que

$$U|\psi_k^p\rangle = \sum_{p'=0}^2 \langle p'|U_k|p\rangle|\psi_k^{p'}\rangle. \quad (5.1)$$

Sejam  $\omega_k^p$  autovalores de  $U_k$  e  $|\omega_k^p\rangle$  os correspondentes autovetores. Temos que  $\omega_k^p$  é autovalor de  $U$  e seus correspondentes autovetores são dados por

$$|v_k^p\rangle = \sum_{p'=0}^2 \langle p'|\omega_k^p\rangle |\psi_k^{p'}\rangle.$$

Na equação (5.1) multiplicamos pela direita os dois lados por  $\langle \psi_k^p|$ , realizamos um somatório em  $p$ , uma integração em  $k$  e usamos a relação de completude obtendo

$$U = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \sum_{p,p'=0}^2 \langle p'|U_k|p\rangle |\psi_k^{p'}\rangle \langle \psi_k^p|.$$

Por indução em  $t$  obtemos

$$U^t = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \sum_{p,p'=0}^2 \langle p'|U_k^t|p\rangle |\psi_k^{p'}\rangle \langle \psi_k^p|. \quad (5.2)$$

Temos que a posição da partícula no instante  $t$  é dada por  $|\psi(t)\rangle = U^t|\psi(0)\rangle$ , onde  $|\psi(0)\rangle$  é o estado inicial da partícula. Consideremos que  $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$  é o estado inicial. Definimos  $\hat{D}$  como o operador distância que aplicado a um vetor da base computacional  $|v\rangle$  retorna  $\hat{D}|v\rangle = d(v)|d\rangle$ , onde  $d(v)$  é a distância de  $v$  para a origem 0, ou seja,

$$d(v) = \begin{cases} v, & \text{se } v \text{ é um vértice,} \\ v + 0,5, & \text{se } v \text{ é uma aresta.} \end{cases}$$

A função característica  $\langle e^{ik_0\hat{D}} \rangle_t = \langle \psi(t)|e^{ik_0\hat{D}}|\psi(t)\rangle$  é útil para calcular o  $n$ -ésimo momento. Usando a definição de  $|\psi(t)\rangle$  e a equação (5.2) obtemos

$$\langle e^{ik_0\hat{D}} \rangle_t = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \sum_{p,p'=0}^2 \langle p|(U_k^t)^\dagger U_{k^*}^t|p'\rangle \langle \psi(0)|\psi_k^p\rangle \langle \psi_{k^*}^{p'}|\psi(0)\rangle, \quad (5.3)$$

com  $k^* = k + k_0$ . Como  $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$  simplificamos a equação (5.3) para

$$\langle e^{ik_0\hat{D}} \rangle_t = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \langle 0|(U_k^t)^\dagger U_{k^*}^t|0\rangle. \quad (5.4)$$

Como a  $n$ -ésima derivada da função característica nos dá o  $n$ -ésimo momento, temos que este último é dado por

$$\langle \hat{D}^n \rangle_t = t^n \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \langle 0|\Lambda_k D \left[ \left( \frac{\partial \ln(\omega_k^p)}{i\partial k} \right)^n \right] \Lambda_k^\dagger |0\rangle + O(t^{n-1}), \quad (5.5)$$

onde  $\Lambda_k = [|\omega_k^0\rangle, |\omega_k^1\rangle, |\omega_k^2\rangle]$  é a matriz  $3 \times 3$  cujas colunas são dadas pelos autovetores de  $U_k$  e  $D[a_i]$  é a matriz diagonal cujas entradas são  $a_1, \dots, a_n$ . Portanto, o próximo passo seria obter os autovalores e autovetores de  $U_k$  para obter a expressão analítica do desvio padrão. Porém, encontrar expressões manipuláveis para ambos se mostrou uma tarefa impossível. Desta forma optamos por prosseguir o cálculo do desvio padrão de forma numérica.

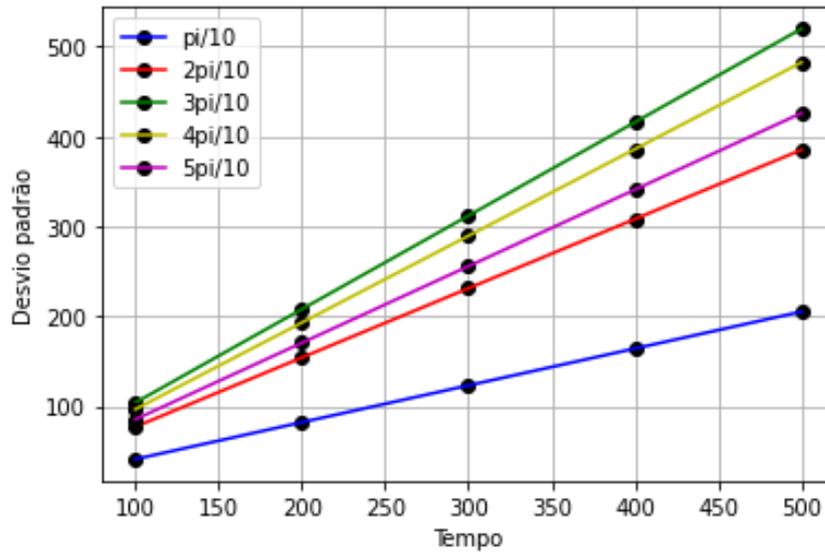


Figura 15 – Fitting do desvio padrão em função do tempo para diferentes valores de  $\theta$ .

### 5.2.1 Calculando o desvio padrão numericamente

Temos que o desvio padrão no instante  $t_0$  é dado pela seguinte expressão:

$$\sigma(t_0) = \sqrt{\sum_i |\langle \psi(t_0) | i \rangle|^2 (d(i) - \mu(t_0))^2}, \quad (5.6)$$

onde  $d(i)$  é a distância do elemento  $i$  para a origem e  $\mu(t_0)$  é a esperança da posição da partícula.

A Figura 15 fornece os valores do desvio padrão para diferentes valores de  $\theta$  e para diferentes instantes de tempo na reta com 3000 vértices e 2999 arestas. Além disso, foi realizado um fitting linear onde podemos observar a dependência linear do desvio padrão em função do tempo. Já a Figura 16 nos fornece o coeficiente angular de retas obtidas de forma similar ao da Figura 15 para  $\theta$  variando de  $\pi/100$  até  $99\pi/100$  pulando de  $\pi/100$ . Quanto maior o coeficiente angular maior o desvio padrão alcançado por tal  $\theta$ , o maior coeficiente angular foi atingido para  $\theta = 33\pi/100$  e  $\theta = 67\pi/100$ .

O desvio padrão é importante no contexto de passeios quânticos, pois quanto maior o desvio padrão de um passeio quântico mais rápido a partícula se locomove pelo grafo, o que é uma propriedade desejável para algoritmos de busca, por exemplo. No nosso caso como a dependência se mostrou linear temos o que é conhecido como movimento balístico.

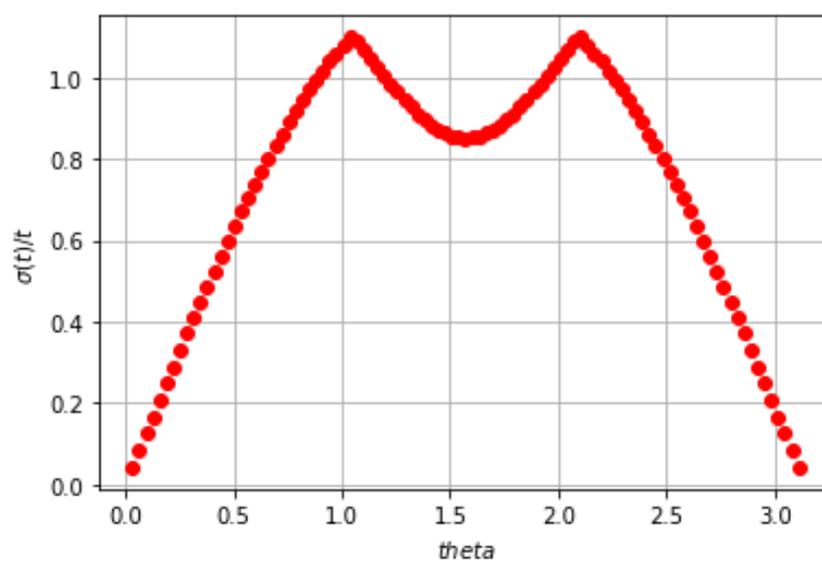


Figura 16 – Coeficiente angular da expressão do desvio padrão calculado de forma numérica em função do tempo.

## 6 Considerações finais

No [Capítulo 1](#) introduzimos o texto com a citação aos principais trabalhos que têm envolvimento com a tese. No [Capítulo 2](#) fazemos uma breve introdução ao passeio quântico contínuo no tempo. Para apresentar tal modelo definimos primeiro as cadeias de Markov clássicas contínuas no tempo. Utilizando estas últimas como base podemos definir o passeio quântico a tempo contínuo. Para exemplificar, mostramos como este modelo seria definido na reta.

No [Capítulo 3](#) definimos o grafo total de um grafo. Vemos a sua relação com o grafo raiz e o grafo linha. Dessa relação é possível entender a prova de uma proposição de Cvetković que fornece os autovalores da matriz de adjacência do grafo total em função dos autovalores da matriz de adjacência do seu grafo raiz. Ainda neste capítulo provamos uma proposição que fornece os autovetores da matriz de adjacência do grafo total.

No [Capítulo 4](#) temos o capítulo com os principais resultados dessa tese. Nós definimos uma versão de passeio quântico contínuo no tempo em um grafo  $G$ , que permite o caminhante pular de vértices para arestas e vice-versa. No nosso modelo, o caminhante pode pular de (1) vértice para vértice, (2) vértice para aresta, (3) aresta para vértice, e (4) aresta para vértice. Para consistentemente definir o operador de evolução, nós usamos a matriz de adjacência do grafo total  $T(G)$ . Usando esse modelo de passeio quântico, nós mostramos que o algoritmo de busca espacial no grafo bipartido completo podemos encontrar um vértice marcado ou uma aresta marcada em  $O(\sqrt{N})$  passos com probabilidade de sucesso  $1 - o(1)$ .

No [Capítulo 5](#) demos a definição dos já conhecido passeio quântico escalonado e do passeio quântico escalonado total. Como novidade formalizamos este último modelo de forma matematicamente consistente. Além disso, de forma numérica obtivemos o valor do desvio padrão para diferentes valores de  $\theta$ .

### 6.1 Trabalhos futuros

Da definição de grafo total, se  $V$  e  $E$  são os subconjuntos de  $V(T(G))$  que representam vértices e arestas do seu grafo raiz  $G$ , respectivamente. Usando o conceito de grafo total, podemos definir três classes relacionadas:  $Q$ -grafos,  $R$ -grafos, e grafos subdivisão ([CVETKOVIĆ, 1975](#); [CVETKOVIĆ; ROWLINSON; SIMIĆ, 2009](#)), que podem ser usadas para definir novos modelos de passeios quânticos nos quais o caminhante se localiza nos vértices e arestas do grafo.  $Q$ -grafo  $Q(G)$  é um subgrafo de  $T(G)$  obtido removendo as arestas cujos pontos são vértices em  $V$ . Um  $R$ -grafo  $R(G)$  é o subgrafo de

$T(G)$  obtido removendo as arestas cujos pontos são vértices de  $E$ . Um grafo subdivisão  $S(G)$  é um subgrafo de  $T(G)$  obtidos removendo arestas cujos dois pontos são vértices em  $V$  e as arestas cujos pontos são dois vértices em  $E$ .

Existem ao menos três extensões interessantes do modelo de passeio quântico total em um grafo  $G$ . Na primeira, o caminhante pode pular de (1) vértice para aresta, (2) aresta para vértice, e (3) aresta para aresta. Neste caso, temos que utilizar a matriz de adjacência do  $Q$ -grafo  $Q(G)$ . Na segunda, o caminhante pode pular de (1) vértice para vértice, (2) vértice para aresta, (3) aresta para vértice. Neste caso, utilizamos a matriz de adjacência do  $R$ -grafo  $R(G)$ . No terceiro caso, o caminhante pode pular de (1) vértice para aresta, e (2) aresta para vértice; não é permitido pular de vértice para vértice nem de aresta para aresta. Neste caso, nós usamos a matriz de adjacência do grafo subdivisão  $S(G)$ . Nós pretendemos analisar essas extensões em trabalhos futuros.

Outros trabalhos futuros possíveis são:

- (1) Analisar a busca espacial com o passeio quântico total no grafo bipartido completo com partições de diferentes tamanhos,
- (2) Analisar a busca espacial com o passeio quântico total com mais de um elemento marcado,
- (3) Estender o modelo do passeio quântico total para diferentes  $\gamma$ 's, dependendo de quais elementos estamos considerando.
- (4) Obter mais resultados numéricos envolvendo o passeio quântico escalonado total.

## Referências

- ABREU, A. et al. Total tessellation cover and quantum walk. *ArXiv:2002.08992*, 2020. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2002.08992>>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 47.
- AHARONOV, D. et al. Quantum walks on graphs. In: *Proc. 33th STOC*. New York: ACM, 2001. p. 50–59. Citado na página 12.
- AHARONOV, Y.; DAVIDOVICH, L.; ZAGURY, N. Quantum random walks. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 48, p. 1687–1690, 1993. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.48.1687>>. Citado na página 12.
- AKBARI, S. et al. The kernels of the incidence matrices of graphs revisited. *Linear Algebra and its Applications*, v. 414, p. 617–625, 2006. Citado na página 12.
- BENEDETTI, C. et al. Quantum spatial search in two-dimensional waveguide arrays. *Phys. Rev. Applied*, American Physical Society, v. 16, p. 054036, 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.16.054036>>. Citado na página 12.
- BEZERRA, G. A.; LUGÃO, P. H. G.; PORTUGAL, R. Quantum-walk-based search algorithms with multiple marked vertices. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 103, p. 062202, 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.103.062202>>. Citado na página 29.
- CHAN, A. et al. Of shadows and gaps in spatial search. *ArXiv:2204.04355*, 2022. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2204.04355>>. Citado na página 29.
- CHILDS, A. M. Universal computation by quantum walk. *Physical review letters*, v. 102, n. 18, p. 180501, maio 2009. Disponível em: <<https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2009PhRvL.102r0501C>>. Citado na página 12.
- CHILDS, A. M.; GOLDSTONE, J. Spatial search by quantum walk. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 70, p. 022314, 2004. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.70.022314>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 31.
- CORMEN, T. H.; LEISERSON, C. E.; RIVEST, R. L. *Introduction to algorithms*. The MIT Press, 1990. Disponível em: <<https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1990ita..book....C>>. Citado na página 64.
- CVETKOVIĆ, D. Spectra of graphs formed by some unary operations. *Publications de l'Institut Mathématique*, Matematički institut SANU, v. 19(33), n. 39, p. 37–41, 1975. Disponível em: <<http://eudml.org/doc/255105>>. Citado na página 58.
- CVETKOVIĆ, D.; ROWLINSON, P.; SIMIĆ, S. *An Introduction to the Theory of Graph Spectra*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2009. (London Mathematical Society Student Texts). Citado 2 vezes nas páginas 25 e 58.
- CVETKOVIĆ, D. M. Spectrum of the total graph of a graph. *Publications de l'Institut Mathématique*, Matematički institut SANU, v. 16(30), n. 36, p. 49–52, 1973. Disponível em: <<http://eudml.org/doc/257407>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 23.

DELVECCHIO, M. et al. Quantum search with a continuous-time quantum walk in momentum space. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, IOP Publishing, v. 53, n. 6, p. 065301, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/1361-6455/ab63ad>>. Citado na página 12.

DÜNDAR, P.; AYTAÇ, A. Integrity of total graphs via certain parameters. *Mathematical Notes*, v. 76, n. 5, p. 665–672, 2004. ISSN 1573-8876. Disponível em: <<https://doi.org/10.1023/B:MATN.0000049665.92885.26>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 19.

FARHI, E.; GUTMANN, S. Quantum computation and decision trees. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 58, p. 915–928, 1998. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.58.915>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 28.

GAO, X.; LUO, Y.; LIU, W. Kirchhoff index in line, subdivision and total graphs of a regular graph. *Discrete Applied Mathematics*, v. 160, n. 4, p. 560–565, 2012. ISSN 0166-218X. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0166218X11004616>>. Citado na página 12.

HAZAMA, F. On the kernels of the incidence matrices of graphs. *Discrete Mathematics*, v. 254, p. 165–174, 2002. Citado na página 12.

HIGUCHI, Y. et al. Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattices. *J. Funct. Anal.*, v. 267, n. 11, p. 4197 – 4235, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 28.

HIGUCHI, Y. et al. Eigenbasis of the evolution operator of 2-tessellable quantum walks. *Linear Algebra and its Applications*, v. 583, p. 257–281, 2019. ISSN 0024-3795. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0024379519303593>>. Citado na página 13.

JANMARK, J.; MEYER, D. A.; WONG, T. G. Global symmetry is unnecessary for fast quantum search. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 112, p. 210502, 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.210502>>. Citado na página 33.

LI, Y.; GU, R.; LEI, H. The generalized connectivity of the line graph and the total graph for the complete bipartite graph. *Applied Mathematics and Computation*, v. 347, p. 645–652, 2019. ISSN 0096-3003. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0096300318310129>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 19.

LIU, X.; WANG, Q. Laplacian state transfer in total graphs. *Discrete Mathematics*, v. 344, n. 1, p. 112139, 2021. ISSN 0012-365X. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0012365X20303253>>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 33.

LUGÃO, P. H. G. et al. Multimarked spatial search by continuous-time quantum walk. *ArXiv:2203.14384*, arXiv, 2022. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2203.14384>>. Citado na página 29.

MATSUE, K.; OGURISU, O.; SEGAWA, E. Quantum walks on simplicial complexes. *Quantum Information Processing*, v. 15, n. 5, p. 1865–1896, 2016. ISSN 1573-1332. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11128-016-1247-6>>. Citado na página 12.

- PORTUGAL, R. Staggered quantum walks on graphs. *Physical Review A*, v. 93, n. 6, p. 062335, jun. 2016. Disponível em: <<https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2016PhRvA..93f2335P>>. Citado na página 13.
- PORTUGAL, R. *Quantum Walks and Search Algorithms*. 2th. ed. Cham: Springer, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 32.
- PORTUGAL, R.; FERNANDES, T. D. Quantum search on the two-dimensional lattice using the staggered model with hamiltonians. *Physical Review A*, v. 95, n. 4, p. 042341, abr. 2017. Disponível em: <<https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2017PhRvA..95d2341P>>. Citado na página 13.
- 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. Disponível em: <<https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2017PhRvA..95a2328P>>. Citado na página 13.
- PORTUGAL, R. et al. The staggered quantum walk model. *Quantum Information Processing*, v. 15, n. 1, p. 85–101, 2016. ISSN 1573-1332. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11128-015-1149-z>>. Citado 3 vezes nas páginas 12, 13 e 28.
- QU, D. et al. Deterministic search on star graphs via quantum walks. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 128, p. 050501, 2022. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.128.050501>>. Citado na página 12.
- SHENVI, N.; KEMPE, J.; WHALEY, K. B. A quantum random walk search algorithm. *Phys. Rev. A*, v. 67, n. 5, p. 052307, 2003. Citado na página 12.
- SILVA, C. F. T.; POSNER, D.; PORTUGAL, R. Walking on vertices and edges by continuous-time quantum walk. *arXiv e-prints, aceito pela revista Quantum Information Processing*, p. arXiv:2206.03375, jun. 2022. Disponível em: <<https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2022arXiv220603375S>>. Citado na página 13.
- SZEGEDY, M. Quantum speed-up of Markov chain based algorithms. In: *45th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*. [S.l.: s.n.], 2004. p. 32–41. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 28.
- TANAKA, H.; SABRI, M.; PORTUGAL, R. Spatial search on Johnson graphs by continuous-time quantum walk. *Quantum Information Processing*, v. 21, n. 2, p. 74, 2022. ISSN 1573-1332. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11128-022-03417-9>>. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 33.
- WANG, K. et al. Experimental realization of continuous-time quantum walks on directed graphs and their application in pagerank. *Optica*, OSA, v. 7, n. 11, p. 1524–1530, 2020. Disponível em: <<http://opg.optica.org/optica/abstract.cfm?URI=optica-7-11-1524>>. Citado na página 12.
- ZHAN, H. Quantum walks on embeddings. *Journal of Algebraic Combinatorics*, v. 53, n. 4, p. 1187–1213, 2021. ISSN 1572-9192. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10801-020-00958-z>>. Citado na página 12.
- ZHAO, S.-L.; HAO, R.-X.; WEI, C. Internally disjoint trees in the line graph and total graph of the complete bipartite graph. *Applied Mathematics and Computation*, v. 422, p. 126990, 2022. ISSN 0096-3003. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0096300322000765>>. Citado na página 12.

# Apêndices

# APÊNDICE A – Revisão de complexidade de tempo

Fazemos aqui uma brevíssima revisão de complexidade computacional, para uma visão mais detalhada sugerimos (CORMEN; LEISERSON; RIVEST, 1990).

**Definição A.1** (Big O).  $f(n)$  é  $O(g(n))$  se, e somente se, para algumas constantes  $c$  e  $N_0$ ,  $f(N) \leq cg(N)$  para todos  $N > N_0$ .

**Definição A.2** ( $\Omega$ ).  $f(n)$  é  $\Omega(g(n))$  se, e somente se, para algumas constantes  $c$  e  $N_0$ ,  $f(N) \geq cg(N)$  para todos  $N > N_0$ .

**Definição A.3** ( $\Theta$ ).  $f(n)$  é  $\Theta(g(n))$  se, e somente se,  $f(n)$  for  $O(g(n))$  e  $f(n)$  for  $\Omega(g(n))$ .

**Definição A.4** (Little O).  $f(n)$  é  $o(g(n))$  se, e somente se,  $f(n)$  for  $O(g(n))$  e  $f(n)$  não for  $\Theta(g(n))$ .

Resumindo a diferença entre Big O e Little o, temos que o primeiro descreve o limite superior da complexidade e o segundo descreve o limite superior excluindo o limite exato.