

Pedro Ruyter Nicácio Falcão

Dinâmica do Pacote de Onda em Caminhadas Quânticas Discretas com Três Estados

Maceió - Brasil

2021

Pedro Ruyter Nicácio Falcão

Dinâmica do Pacote de Onda em Caminhadas Quânticas Discretas com Três Estados

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Alagoas, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física.

Universidade Federal de Alagoas – UFAL

Instituto de Física

Programa de Pós-Graduação

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

Coorientador: Prof. Dr. Guilherme Martins Alves de Almeida

Maceió - Brasil

2021

Catálogo na Fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 – 1767

F178d Falcão, Pedro Ruyter Nicácio.
Dinâmica do pacote de onda em caminhadas quânticas discretas com três estados
/ Pedro Ruyter Nicácio Falcão. – 2021.
93 f. : il. color.

Orientador: Marcelo Leite Lyra.
Coorientador: Guilherme Martins Alves de Almeida.
Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió.

Bibliografia: f. 81-86.
Anexos: f. 87-93.

1. Caminhadas quânticas. 2. Leis de escala. 3. Teorias não-lineares. I. Título.

CDU: 530.145



PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**“Dinâmica do Pacote de Onda em Caminhadas Quânticas Discretas
com Três Estados”**

por

Pedro Ruyter Nicácio Falcão

A Banca Examinadora composta pelos professores Marcelo Leite Lyra (orientador e presidente da banca), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Guilherme Martins Alves de Almeida, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Wandearley da Silva Dias, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, e André Maurício Conceição de Souza, da Universidade Federal de Sergipe, consideram o candidato aprovado com grau “A”.

Maceió, 10 de novembro de 2021.


Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra


Prof. Dr. Guilherme Martins Alves de Almeida


Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias


Prof. Dr. André Maurício Conceição de Souza

Agradecimentos

Inicialmente, gostaria de agradecer ao meu orientador, o professor Marcelo Lyra. São quase 6 anos que ele orienta meus trabalhos e a minha formação, servindo como fonte de inspiração para a minha trajetória acadêmica e como modelo de pessoa empática e paciente que desejo me tornar;

Gostaria de agradecer também aos meus pais e às minhas irmãs, que sempre apoiaram minhas decisões e me incentivaram a continuar na minha trajetória acadêmica. Também gostaria de agradecer a minha avó, dona Maria Luíza, por igualmente me apoiar e ser um modelo de ser humano empático e bondoso ao qual almejo me tornar. Vó, eu te amo!

Também gostaria de agradecer aos amigos de pós-graduação Anderson Buarque e João Pedro, além dos professores Wandearley Dias e Guilherme Almeida. Vocês acompanharam o desenvolvimento dos trabalhos que serão discutidos nessa monografia, além de contribuírem com discussões muito proveitosas para o meu amadurecimento acadêmico.

Além disso, sou muito grato aos amigos que fiz durante o curso de física, em especial a Helena Bordini, Mariana Monteiro, Nicolas Tenório, Laís Alves, Miquéias Jacinto, Carol Costa, Zezo, Graça Regina, Fred Passos, Denisson Gutemberg, Yure Matheus, Lucielly Freitas e Luciano Junior. Além dos já mencionados Anderson Buarque e João Pedro Mendonça.

Aos meus amigos de infância, que tanto me apoiam e me incentivam. São eles: Anderson, Morgana, Miltinho, Ana Íris, Ingrid, Sosô, Brendinha, Pontes, Giovanni, Júlia, Igor, Erick, Pedro, Arthur, Lívia e Heitor. Obrigado por tudo!

Às demais pessoas que fizeram parte desses meus 23 anos de vida. Entre eles estão a minha psicóloga Fernanda, minha psiquiatra Camila, meu sensei Paulus Tertius, meu professor de inglês Victor, os professores que fizeram parte da minha formação, além dos demais funcionários do instituto de física, em especial ao seu Miguel e a dona Maria.

Ao CNPq e a CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Atualmente, há um grande interesse em estudar computação quântica e teoria da informação quântica. Estudos recentes mostram que esses computadores podem realizar cálculos computacionais de maneira muito mais rápida que qualquer computador clássico, além de servirem para entendermos propriedades fundamentais de sistemas quânticos. Dentre esses novos estudos, as caminhadas quânticas servem como um análogo do passeio aleatório clássico, amplamente estudado na área de computação e na descrição de sistemas físicos. Nesse trabalho, estudaremos as propriedades das caminhadas quânticas discretas em meios lineares e não-lineares. Sendo mais específico, daremos uma atenção especial a caminhada quântica de três estados, um modelo que possui uma localização intrínseca do caminhante na posição de origem. Mostraremos que, quando consideramos um modelo linear, quantidades físicas relevantes no estudo de caminhadas quânticas satisfazem leis de escalas universais na vizinhança do ponto onde ocorre uma transição entre estados localizados e completamente estendidos. Além disso, obtemos uma expressão analítica para a razão de participação na configuração onde o caminhante está completamente estendido ao longo da rede. Essa expressão também será válida para outras caminhadas que possuam as mesmas características. Quando consideramos uma dinâmica não-linear, veremos que há o surgimento de um novo fenômeno na literatura da caminhada quântica, a irradiação da porção localizada do pacote de onda. Mostraremos que essa irradiação segue uma determinada lei de potência, que independe tanto da configuração inicial quanto do parâmetro de não-linearidade do sistema. Esperamos que os resultados obtidos ao longo dessa monografia tragam novas ideias a serem implementadas em um futuro próximo no contexto de caminhadas quânticas, de modo sejam úteis para o desenvolvimento de estudos futuros.

Palavras-Chaves: Caminhadas Quânticas, Localização, Leis de Escalas, Não-Linearidade.

Abstract

Currently, there is a great interest in studying quantum computation and quantum information theory. Recent studies show that these computers can realize computational calculations much more faster than any classical computer, in addition to serving to understand fundamental properties of quantum systems. Among this new studies, the quantum walks serves as an analogue of the classical random walks, which is widely studied in computation science and in the description of physical systems. In this study, we will analyze the properties of discrete-time quantum walks in linear and nonlinear mediums. Being more specific, we focused on the three-state quantum walk, a model that posses an intrinsic localization around the initial position. We show that, in the linear case, relevant physical quantities in the quantum walk literature satisfies universal dynamical scaling laws in the vicinity of the point where occur the transition between localized and delocalized states. Further, we obtain an analytical expression to the participation ratio for the configuration where the walker are completely delocalized in the lattice. This expression is also valid for others quantum walks that posses the same characteristics. When we consider a nonlinear dynamics, we will see that there is an emergence of a new behavior in the quantum walk literature, the irradiation of the localized portion of the wave-packet. It is display that this irradiation follows an specific power-law, which is independent of the initial state and also of the nonlinearity parameter. We hope that the results obtained through this monography brings new ideas to be implemented in a near future in the context of quantum walks, in such a way to be useful in the development of new studies.

Keywords: Quantum Walks, Localization, Scaling Laws, Nonlinearities.

Lista de ilustrações

| | |
|--|----|
| Figura 1 – Implementação da caminhada aleatória clássica em um tabuleiro de Galton. | 14 |
| Figura 2 – (a) Comparativo entre as distribuições de probabilidade da caminhada aleatória clássica e da caminhada quântica, mostrando um comportamento bastante diferente entre as duas; (b) Comparativo entre as dispersões Ω do caso clássico e quântico, mostrando que a caminhada quântica possui um alargamento quadraticamente mais rápido que o caso clássico. | 17 |
| Figura 3 – Distribuição de probabilidade após 100 passos da caminhada Hadamard para as configurações (a) $ \psi_0\rangle = 0, \uparrow\rangle$ e (b) $ \psi_0\rangle = 0, \downarrow\rangle$. Perceba a clara dependência da distribuição de probabilidade com a escolha do estado inicial | 22 |
| Figura 4 – (a) Estrutura de banda da caminhada Hadamard; (b) Velocidade de grupo correspondentes. | 25 |
| Figura 5 – Representação de um qubit via esfera de Bloch. | 28 |
| Figura 6 – Distribuição de probabilidade para três valores distintos de θ . Observe que a velocidade do caminhante depende diretamente do parâmetro da moeda. | 29 |
| Figura 7 – Probabilidade de retorno R_0 em função do tempo para a caminhada Hadamard para uma configuração inicial completamente simétrica. Aqui, vemos que R_0 cai a medida que o caminhante evolui no tempo, mostrando que não há estados armadilhados. | 31 |
| Figura 8 – Razão de participação ζ em função do tempo da caminhada quântica Hadamard para a configuração simétrica. Conforme podemos ver, ζ cresce continuamente com o tempo, indicando a ausência de estados localizados. | 32 |
| Figura 9 – Evolução temporal da dispersão Ω para diversos valores do parâmetro θ . Conforme podemos ver, o caminhante se propagará balisticamente ao longo da rede, exceto no caso extremo $\theta = \pi/2$, onde, como o caminhante ficará localizado na posição de origem e em seus primeiros vizinhos, a dispersão Ω não evoluirá temporalmente. | 34 |
| Figura 10 – (a) Modelo de uma cavidade óptica com modos longitudinais m equidistantes; (b) Adicionando um modulador eletro-óptico (M.E.O) ao sistema, haverá o cruzamento dos níveis de energia ortogonais; (c) Esquema de uma cavidade óptica com dois M.E.O rotacionados entre si, de modo que haja os cruzamentos de Landau-Zener. | 39 |

| | |
|--|----|
| Figura 11 – Implementação física da caminhada quântica não-linear em um sistema óptico. Aqui, o divisor de feixes (D.F) atuará como a moeda Hadamard, enquanto que os moduladores eletro-ópticos atuarão como um operador deslocamento condicional, com os graus de liberdade internos sendo representados por cada divisão desse sistema. | 40 |
| Figura 12 – (a) Comparação entre as distribuições de probabilidades da caminhada quântica linear e não-linear. Perceba que, no regime onde $\chi \neq 0$, pulsos solitônicos são encontrados; (b) Evolução da distribuição de probabilidade da caminhada quântica não-linear para $\chi = 0.49$. Aqui, vemos uma colisão inelástica entre os sólitons. | 41 |
| Figura 13 – Diagrama da probabilidade de retorno R_0 no plano $\theta \times \chi$ para o estado $ \psi\rangle = 0\rangle \otimes \downarrow\rangle$. Perceba que o regime de auto-armadilhamento do caminhante se estabelece ao redor de $\theta = \pi/2$ | 42 |
| Figura 14 – Evolução temporal da densidade de probabilidade $ \psi_n ^2$ do caminhante quântico de três estados. Observe que há uma alta probabilidade do caminhante ficar localizado na posição de origem e em seus primeiros vizinhos, enquanto o restante se propaga balisticamente ao longo da rede. | 45 |
| Figura 15 – Probabilidade de retorno em função do número de passos t para a configuração inicial $ \psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(i L\rangle + R\rangle)$. Como podemos ver no inset, essa quantidade irá saturar em um valor bem definido após um tempo longo. | 49 |
| Figura 16 – Distribuição de probabilidade da caminhada quântica de três estados após 100 passos para três valores distintos do parâmetro ρ | 52 |
| Figura 17 – Diagrama do segundo momento reescalado em função dos coeficientes g_1 e g_2 . Como podemos ver, a maior variância é obtida quando apenas o estado $ \sigma_1^-\rangle$ é contabilizado na configuração inicial. | 56 |
| Figura 18 – Distribuição de probabilidade após 1000 passos para o estado $ \sigma^+\rangle$. Nessa configuração, há uma alta probabilidade do caminhante ficar na origem, enquanto não há divergência em $\nu = \pm\rho$ | 57 |
| Figura 19 – Distribuição de probabilidade para o estado $ \sigma_1^-\rangle$ após $t = 1000$. Há uma clara ausência de estados localizados no sistema, bem como uma divergência característica em $\nu = \pm\rho$ | 58 |
| Figura 20 – Distribuição de probabilidade para o estado $ \sigma_2^-\rangle$ após 1000 passos. Perceba que há uma divergência em $\omega(\nu)$ quando $\nu = \pm\rho$ e que a densidade de velocidade de grupo possui um comportamento muito característico. Além disso, há uma alta probabilidade do caminhante permanecer ao redor da origem. | 59 |

| | |
|--|----|
| Figura 21 – Distribuição de probabilidade para o estado $ \sigma_L\rangle$. Perceba que há uma divergência apenas no lado esquerdo da cadeia, gerando uma distribuição de probabilidade bem diferente das demais apresentadas. | 60 |
| Figura 22 – Evolução temporal da densidade de probabilidade $ \psi_n ^2$ para diversos valores de θ . Observe que, quando $\theta = \theta_c$, não há localização ao redor da posição inicial. | 63 |
| Figura 23 – Probabilidade de retorno R_0 em função do tempo para diversos valores de θ . Como podemos ver, R_0 satura em um valor finito para a maioria dos ângulos, com exceção do ângulo $\theta = \theta_c$, onde decai proporcionalmente ao número de passos t | 64 |
| Figura 24 – (a) Evolução sublinear de $\delta(t) = \rho t - n_m$, mostrando que $\delta(t) \propto t^{1/3}$; (b) Evolução temporal da probabilidade do pico da frente de onda P_{n_m} indicando que essa quantidade decai proporcional à $t^{2/3}$ | 65 |
| Figura 25 – Evolução temporal da razão de participação ζ para o caminhante de Grover em $\theta = \theta_c$. Aqui, podemos ver que a participação cresce de acordo com a expressão obtida nesse capítulo, $\zeta(\theta_c) = at/[b + \ln(t)]$, com $a = 3.798$ e $b = 1.54$. O inset mostra a dependência temporal do expoente efetivo da lei de potência, evidenciando a lenta convergência para o comportamento linear. | 67 |
| Figura 26 – (a) Probabilidade de retorno em função de θ para diversos valores de t , onde $\tau_0 = 2000$. Podemos ver que converge rapidamente para um valor finito, exceto na vizinhança do ângulo crítico θ_c ; (b) Colapso dos dados de R_0 na vizinhança do ângulo crítico, mostrando uma lei de escala universal. | 68 |
| Figura 27 – (a) Razão de participação ζ em função da variável de estado θ para diversos valores de t , onde $\tau_c = 2000$; (b) Colapso dos dados de $\zeta(\theta)$ na vizinhança do ângulo crítico, revelando outra lei de escala universal para o caminhante quântico de três estados. | 69 |
| Figura 28 – (a) Razão de participação ζ normalizada no plano $\rho \times \theta$, atingindo seu valor máximo no caminhante quântico de Grover; (b) Diagrama da probabilidade de retorno R_0 no plano $\rho \times \theta$. Perceba que, em ambas as figuras, o comportamento assintótico de ambas as quantidades físicas analisadas escalam da maneira que foi reportada nesse capítulo. | 70 |
| Figura 29 – Evolução temporal da densidade de probabilidade para diversos valores de χ para os estados (a)-(d) $ \sigma^+\rangle$ e (e)-(h) $ \sigma_1^-\rangle$. Aqui, torna-se claro que a adição de um operador não-linear na dinâmica do sistema muda drasticamente a distribuição de probabilidade do caminhante, levando ao fenômeno da radiação do pulso central. | 75 |

| | |
|--|----|
| Figura 30 – Razão de participação ζ em função do número de passos para os estados (a) $ \sigma^+\rangle$ e (b) $ \sigma_1^-\rangle$ e para diversos valores do parâmetro de não-linearidade. Ambas as figuras apresentam a dinâmica de irradiação quando efeitos não-lineares são levados em consideração. | 76 |
| Figura 31 – Probabilidade de retorno em função do número de passos para os estados (a)-(d) $ \sigma^+\rangle$ e (e)-(h) $ \sigma_1^-\rangle$. Aqui, consideramos os mesmos valores de χ analisados anteriormente. Conforme podemos ver, o fenômeno de radiação do pulso central se torna claro, revelando que essa dinâmica acontece com uma lei de potência aproximada. | 78 |
| Figura 32 – Tempo de escape τ_c em função do parâmetro de não-linearidade χ para os estados (a) $ \sigma^+\rangle$ e (b) $ \sigma_1^-\rangle$. Perceba que o comportamento é bem distinto para os dois casos. Em especial, para o vetor $ \sigma^+\rangle$, existem alguns valores de χ onde τ_c cresce abruptamente. | 79 |

Sumário

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 13 |
| 1.1 | Caminhada Clássica | 13 |
| 1.2 | Computação Quântica | 15 |
| 1.3 | Caminhada Quântica | 16 |
| 1.4 | Não-Linearidade em sistemas físicos | 18 |
| 1.5 | Organização da dissertação | 19 |
| 2 | CAMINHADA QUÂNTICA DISCRETA | 20 |
| 2.1 | Estrutura da caminhada quântica | 20 |
| 2.2 | Caminhada Hadamard | 21 |
| 2.2.1 | Análise Fourier da Caminhada Hadamard | 23 |
| 2.3 | Generalização do Operador Moeda | 27 |
| 2.4 | Localização em Caminhadas Quânticas | 29 |
| 2.4.1 | Probabilidade de Retorno | 31 |
| 2.4.2 | Razão de Participação | 31 |
| 2.4.3 | Dispersão | 33 |
| 2.5 | Decoerência em caminhadas quânticas | 34 |
| 2.6 | Implementações físicas e potenciais aplicações | 35 |
| 2.7 | Não-Linearidade em caminhadas quânticas | 36 |
| 2.7.1 | Tabuleiro óptico de Galton não-linear | 37 |
| 3 | CAMINHADA QUÂNTICA DE TRÊS ESTADOS | 43 |
| 3.1 | Caminhante Quântico de Grover com Três Estados | 44 |
| 3.1.1 | Análise de Fourier do Caminhante de Três Estados | 46 |
| 3.1.2 | Probabilidade de Retorno | 48 |
| 3.2 | Generalização do Operador Moeda | 49 |
| 3.3 | Propriedades dos Autovetores na Caminhada Quântica de Três Estados | 54 |
| 4 | LEIS DE ESCALA UNIVERSAIS EM CAMINHADAS QUÂNTICAS DE TRÊS ESTADOS | 61 |
| 4.1 | Modelo Teórico | 61 |
| 4.2 | Resultados | 62 |
| 4.2.1 | Análise do Comportamento Assintótico | 62 |
| 4.2.2 | Leis de Escala Universais | 67 |

| | | |
|------------|---|-----------|
| 5 | NÃO-LINEARIDADE EM CAMINHADAS QUÂNTICAS DE TRÊS ESTADOS | 72 |
| 5.1 | Modelo Teórico | 72 |
| 5.2 | Resultados | 74 |
| 6 | CONCLUSÃO | 80 |
| | REFERÊNCIAS | 82 |
| | ANEXO A – ARTIGO PUBLICADO NO PERIÓDICO PHYSICAL REVIEW E. | 88 |

1 Introdução

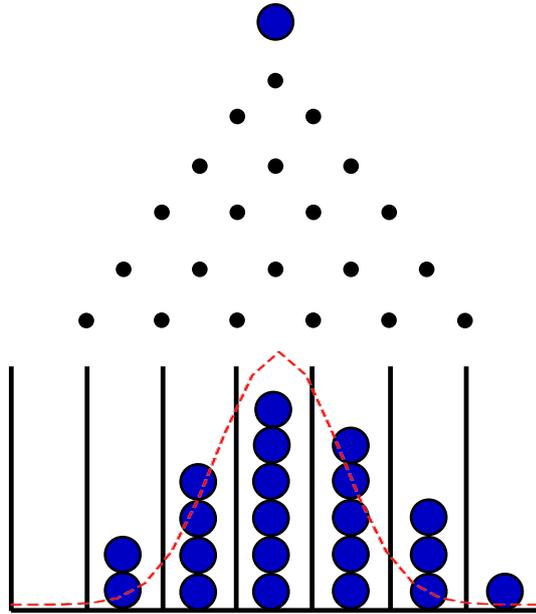
É indiscutível a importância dos computadores nos dias atuais. Eles revolucionaram muitos aspectos da sociedade contemporânea, fazendo tarefas antes inimagináveis pelas pessoas dos séculos passados. Além disso, o avanço da computação permitiu com que a ciência progredisse vertiginosamente ao longo do último século. Entretanto, baseando-se nas propriedades da mecânica quântica, uma nova forma de estudarmos computação está surgindo ao longo das últimas décadas. A computação quântica, apesar de ainda embrionária, é especialmente promissora para o progresso científico, visto que pode permitir a realização de cálculos computacionais de maneira muito mais rápida que qualquer computador clássico, o que permite simularmos sistemas de alta complexidade. Além do progresso científico, há uma alta expectativa que essa nova forma de computação possa ser utilizada em diversas outras áreas de interesse tecnológico. De fato, grandes empresas como a Google ou a IBM, além das principais grandes potências do globo, estão investindo muito no desenvolvimento dessas novas tecnologias. Assim, ao longo deste trabalho, iremos estudar as propriedades da caminhada quântica, um análogo quântico ao passeio aleatório clássico e que possui uma grande aplicabilidade no estudo da computação quântica.

1.1 Caminhada Clássica

Em 1905, Pearson e Rayleigh realizaram uma discussão interessantíssima sobre a solução do problema de um caminhante iniciando em uma determinada posição e que pode mover-se aleatoriamente para qualquer um dos lados a cada passo, sendo assim cunhado o termo caminhada aleatória (*random walk*) (PEARSON, 1905; RAYLEIGH, 1905). Desde então, esse conceito de caminhada aleatória foi empregado em diversas áreas de conhecimento como, por exemplo, um modelo para realizar previsões automáticas sobre possíveis interesses de usuários, introduzido por Brand et al. (BRAND, 2005). Outro exemplo de aplicação é na previsão de links em uma rede, onde o algoritmo prevê a possibilidade de conexão entre dois nós ainda não conectados. Para um melhor estudo sobre aplicações de caminhadas aleatórias em algoritmos computacionais, Xia et al. publicou um artigo de revisão recentemente com ênfase nessa temática (XIA et al., 2019). Além dessas potenciais aplicações na ciência da computação, esses fenômenos estocásticos aparecem em muitos sistemas físicos, como no processo de difusão gasosa, processos biológicos, aplicações em astronomia, entre outros (CHANDRASEKHAR, 1943).

Para entendermos melhor o conceito de caminhada aleatória, vamos estudar o caminhante unidimensional situado em uma rede discreta. O procedimento é bastante simples, vamos supor que uma partícula está inicialmente localizada na posição n_0 e terá,

Figura 1 – Implementação da caminhada aleatória clássica em um tabuleiro de Galton.



Fonte: Autor - 2021

a cada passo, uma probabilidade p de se mover para a direita e $q = 1 - p$ de se mover para a esquerda. Isso pode ser implementado pela ação de jogar uma moeda enviesada a cada passo, de modo que o caminhante se moverá de acordo com o resultado da moeda. Aqui, cada passo terá um tamanho bem definido l que, por conveniência, vamos considerar que esse passo é unitário. Então, ao realizar N vezes essa ação de jogar a moeda, o caminhante estará localizado em uma posição entre $-N$ e $+N$. Entretanto, ao estudarmos diversas vezes esse passeio aleatório e medirmos, ao final de cada caminhada, a posição final do caminhante, podemos atribuir uma probabilidade de encontrarmos a partícula na posição n após realizarmos N passos. Essa probabilidade $P(n)$ pode ser facilmente calculada e é dada por:

$$P(n) = \frac{N!}{\left[\frac{(N+n)}{2}\right]! \left[\frac{(N-n)}{2}\right]!} \left(\frac{1}{2}\right)^N, \quad (1.1)$$

onde utilizamos que $p = q = 1/2$. Essa é a famosa distribuição binomial e, no limite para o contínuo, pode ser aproximado para uma distribuição Gaussiana, onde temos uma alta probabilidade de encontrarmos o caminhante ao redor da posição original e essa distribuição se alargará difusivamente, ou seja, é proporcional a \sqrt{N} .

Esse modelo de caminhada aleatória unidimensional pode ser facilmente implementada em um tabuleiro de Galton. Nesse modelo, uma bolinha será solta através de uma estrutura de pinos, conforme ilustrado na figura 1. Esses pinos farão com que a bolinha possa se mover para a esquerda ou para a direita, onde cada uma dessas rotas possui

uma probabilidade de 50%. Após sucessivas repetições desse processo, essa bolinha será depositada no fundo de uma estrutura que determinará a sua posição final. Ao realizarmos uma série de amostras, podemos obter uma distribuição de probabilidade para as possíveis posições finais dessa bolinha que, no limite do caso ideal, será uma distribuição binomial, conforme ilustrado na curva vermelha tracejada da figura 1.

1.2 Computação Quântica

No começo dos anos 80, Richard Feynman sugeriu que poderíamos explorar as propriedades da mecânica quântica para pensarmos novas formas de realizar computação, já que as máquinas clássicas demandavam bastante poder computacional para simular sistemas quânticos complexos (FEYNMAN, 2018). Já nos anos 90, pesquisadores começaram a realizar estudos demonstrando que essa nova forma de pensar a computação tem um potencial gigantesco para aplicações futuras.

Na computação clássica, temos que o bit é a menor unidade de informação possível. Esse bit é um valor binário, podendo assim assumir apenas dois estados possíveis, que podem ser representados como 0/1, +/− ou qualquer outra notação que indique esses dois estados possíveis. Já no caso da computação quântica e na teoria de informação quântica, a menor unidade de informação possível é o bit quântico (qubit), que pode ser representado por qualquer sistema de dois níveis como, por exemplo, o estado fundamental e excitado de um átomo, os possíveis estados de spin de um átomo submetido a um campo magnético e assim por diante. O importante é entender que, diferentemente do caso clássico, o qubit pode estar em qualquer superposição desses dois estados e é representado como:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad (1.2)$$

onde a e b são amplitudes complexas que obedecem a condição de normalização, ou seja, $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Essa natureza quântica do sistema, caracterizado pelo princípio da superposição, é fundamental para entendermos a potencial vantagem computacional que os computadores quânticos podem fornecer em relação aos clássicos. Em especial, quando estamos trabalhando com sistemas de vários qubits, o poder computacional cresce exponencialmente.

Ainda na década de 80, os primeiros resultados mostrando que computadores quânticos poderiam realizar tarefas muito mais rápidas que qualquer computador clássico foram publicados (DEUTSCH, 1985). Posteriormente, Peter Shor desenvolveu um algoritmo capaz de fatorar qualquer número inteiro exponencialmente mais rápido que qualquer computador clássico (SHOR, 1994; SHOR, 1999). Além disso, Grover elaborou um algoritmo capaz de pesquisar um elemento qualquer de uma base de dados quadraticamente mais rápido que os melhores algoritmos clássicos (GROVER, 1997). Em 2019, pesquisadores do

Google afirmaram que seu computador quântico de 53 qubits era capaz de realizar um determinado cálculo em um tempo de aproximadamente 200 segundos, algo que os melhores computadores clássicos demorariam cerca de 10.000 anos! (ARUTE et al., 2019). Apesar do problema resolvido não ter grande aplicabilidade e haverem controvérsias quanto a esse resultado, com a IBM alegando que um supercomputador poderia resolver o problema em apenas dois dias e meio, esse resultado mostra o grande poder computacional que a computação quântica pode trazer em um futuro próximo.

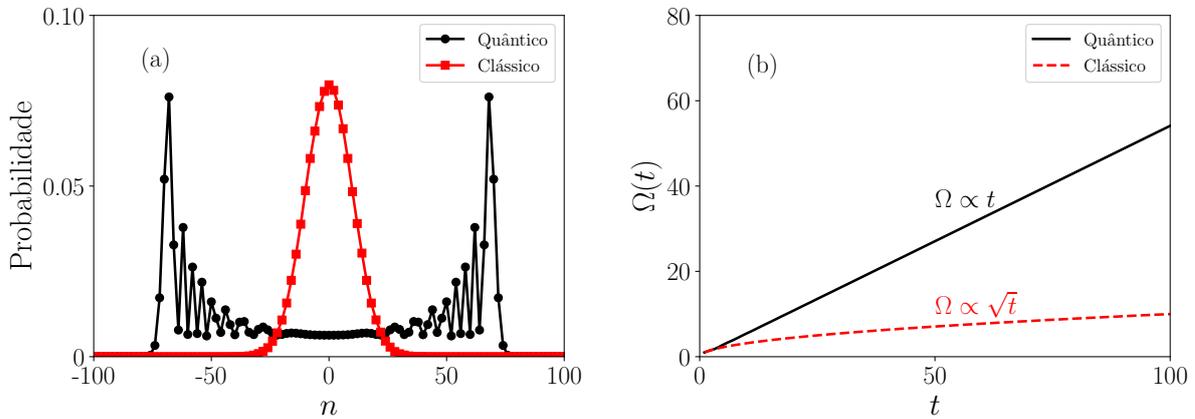
Ainda há muitos fenômenos a serem entendidos e, portanto, novas áreas excitantes estão surgindo com o avançar dos estudos nas áreas de computação e informação quântica. Por exemplo, estudos estão sendo realizados para entender como proteger estados quânticos de ruídos indesejados. Além disso, a criptografia quântica parece ser extremamente promissora para proteger segredos de produção de grandes empresas e países de ataques cibernéticos, visto que esses protocolos tornariam o computador inviolável. Isso mostra o quanto entendermos essa nova área de conhecimento é fundamental.

1.3 Caminhada Quântica

Devido a esse crescente interesse na computação quântica, bem como a importância dessas caminhadas aleatórias em processos físicos e computacionais, é compreensível a busca por um análogo quântico a esse modelo. Com isso em mente, Aharonov et al. (AHARONOV; DAVIDOVICH; ZAGURY, 1993) introduziram o conceito de caminhadas quânticas utilizando um sistema de dois níveis, onde o caminhante se moveria em uma superposição de estados ao longo da cadeia e, portanto, permitindo com que as amplitudes da função de onda do caminhante interfiram entre si, algo que não ocorre no caso clássico. Essa interferência entre as amplitudes é essencial para a compreensão de um alargamento da distribuição de probabilidade quadraticamente mais rápida que no caso do caminhante clássico padrão, discutido na primeira seção dessa dissertação.

Atualmente, as caminhadas quânticas podem ser divididas em dois casos: O primeiro é o caso contínuo, que foi introduzido por Farhi e Gutmann (FARHI; GUTMANN, 1998) ao considerarem uma rede discreta mas intervalos de tempo contínuos. O segundo é o caso discreto, que foi introduzida por Watrous (WATROUS, 2001) ao considerar que a dinâmica também ocorre em uma rede discreta mas em tempos discretizados. Na caminhada quântica contínua, a evolução temporal é dada pelo Hamiltoniano do sistema, enquanto a evolução do caso discreto é obtida através de sucessivas aplicações de um operador unitário. Além disso, o caso discreto tem um espaço de Hilbert total que, além do sub-espaço das posições da rede, ele também incorpora um outro espaço associado aos graus de liberdade internos da partícula. Esse sub-espaço extra faz com que a caminhada discreta seja mais útil em alguns contextos que o caso contínuo [ver (AMBAINIS; KEMPE; RIVOSH, 2004)].

Figura 2 – (a) Comparativo entre as distribuições de probabilidade da caminhada aleatória clássica e da caminhada quântica, mostrando um comportamento bastante diferente entre as duas; (b) Comparativo entre as dispersões Ω do caso clássico e quântico, mostrando que a caminhada quântica possui um alargamento quadraticamente mais rápido que o caso clássico.



Fonte: Autor - 2021

Na figura 2(a), plotamos um comparativo entre as distribuições de probabilidade após 100 passos da caminhada aleatória clássica e da caminhada quântica Hadamard com uma distribuição simétrica. Esse caso é o mais estudado, onde o operador moeda quântica é um análogo a uma moeda justa no caso clássico. Perceba que, no caso aleatório padrão, teremos uma distribuição Gaussiana, conforme mencionado anteriormente. Já no caso quântico, devido a sucessivas interferências entre as amplitudes de probabilidade, a distribuição será muito distinta do caso anterior, tendo um alargamento que evolui quadraticamente mais rápido que no caso clássico, conforme evidenciado na figura 2(b). Essa propriedade é bastante útil no desenvolvimento de algoritmos de busca, que realizam uma performance que supera a de qualquer algoritmo clássico. Além disso, ambos os tipos de caminhadas quânticas demonstraram a capacidade de realizar computação quântica universal (CHILDERS, 2009; LOVETT et al., 2010).

A caminhada quântica também pode ser bastante útil para a simulação de fenômenos físicos. Por exemplo, a dinâmica de um elétron em uma rede cristalina sob a influência de um campo elétrico pode ser simulada ao adicionarmos operadores na evolução do caminhante, conforme mostrado por Buarque et al. (BUARQUE; LYRA; DIAS, 2021). Também podemos usar a caminhada quântica para estudarmos transições de fases quânticas em redes ópticas (CHANDRASHEKAR; LAFLAMME, 2008; WANG et al., 2019) ou para explorarmos fases topológicas da matéria (KITAGAWA et al., 2010; ASBÓTH, 2012; RAKOVSKY; ASBOTH, 2015). Além disso, diversos trabalhos que foram publicados ao longo dos últimos anos mostraram que as caminhadas quânticas podem ser implementadas tanto em sistemas ópticos quanto em condensados de Bose-Einstein, conforme pode ser visto em diversos exemplos ilustrados em (WANG; MANOUCHEHRI, 2013).

1.4 Não-Linearidade em sistemas físicos

Efeitos não-lineares são amplamente estudados na física. Por exemplo, novos dispositivos estão sendo pensados para transmitirem assimetricamente formas de energia como, por exemplo, transferência de calor, ondas acústicas ou ondas eletromagnéticas (CALOZ et al., 2018; LIANG et al., 2010; NASSAR et al., 2020; LI et al., 2012; MALDOVAN, 2013). Como a transmissão assimétrica de corrente elétrica permitiu a criação do diodo eletrônico, esses novos dispositivos poderão ter um impacto direto na criação de novas tecnologias.

Diversos mecanismos são responsáveis por essa quebra da linearidade do sistema. Por exemplo, efeitos não-lineares em óptica são observados como uma resposta a aplicação de um campo eletromagnético externo no sistema. Quando fazemos isso, a polarização P induzida pode ser expandida em termos de mais alta ordem do campo elétrico E , além do termo linear usualmente estudado. Assim, P é escrito da forma:

$$P = \epsilon_0(\chi_1 E + \chi_2 E^2 + \chi_3 E^3 + \dots). \quad (1.3)$$

Aqui, ϵ_0 é a permissividade elétrica e χ_i é a i -ésima susceptibilidade do meio. Perceba que o comportamento linear é recuperado quando consideramos apenas o primeiro termo da expansão acima. Essas não-linearidades podem ser implementadas facilmente em um laboratório de óptica e trazem diversos efeitos interessantes como, por exemplo, a mudança da cor de um feixe de luz ou o aparecimento de estruturas solitônicas.

Além disso, estruturas não-lineares também aparecem na mecânica quântica. Visto que a teoria quântica é usualmente linear, a não-linearidade surge como um fenômeno emergente de uma aproximação do campo médio do sistema. Há vários modos de modelarmos esses fenômenos não-lineares em sistemas quânticos. Dentre eles, podemos destacar a equação não-linear de Schrödinger, que é amplamente estudada no estudo de propriedades de transporte eletrônico. Essa equação é da forma:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) + \gamma |\psi(x, t)|^2 \right) \psi(x, t), \quad (1.4)$$

onde \hbar é a constante de Planck reduzida, $\psi(x, t)$ é a função de onda do sistema, $V(r)$ é o potencial e γ é uma constante multiplicativa que acompanha o termo não-linear.

No estudo de condensados de Bose-Einstein, podemos usar a equação de Gross-Pitaevskii para descrever o estado fundamental de um sistema de N bósons idênticos. Essa equação emerge quando consideramos a interação entre esses bósons idênticos através da equação linear de Schrödinger e utilizamos a aproximação de Hartree-Fock, onde a função de onda dos N bósons é escrita como o produto de cada partícula individualmente. A

equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo é dada por:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) + \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} |\psi(x, t)|^2 \right) \psi(x, t) = \mu \psi(x, t), \quad (1.5)$$

onde μ é o potencial químico do sistema e a_s é o comprimento de espalhamento de ondas do tipo s para dois bósons interagentes.

Perceba que esses exemplos citados acima são os mesmos meios onde diversos avanços experimentais da caminhada quântica estão sendo reportados. Portanto, podemos estudar a ação da não-linearidade na evolução do nosso caminhante e obter assim novos efeitos dinâmicos ou a simulação de sistemas quânticos não-lineares. Além disso, veremos ao longo do próximo capítulo que efeitos não-lineares são importante no desenvolvimento de algoritmos de busca, que também são bastantes estudados na literatura de caminhadas quânticas.

1.5 Organização da dissertação

Esse trabalho será organizado da seguinte forma: No capítulo 2, iremos entender a estrutura básica da caminhada quântica em uma rede unidimensional, detalharemos a evolução do caminhante e mostraremos algumas quantidades físicas que detalham se existem estados localizados em nosso sistema. Além disso, iremos citar algumas potenciais aplicações das caminhadas quânticas, bem como o efeito da não-linearidade na evolução do caminhante. No capítulo 3, estudaremos o comportamento do sistema quando adicionamos uma quiralidade extra no espaço dos graus de liberdade, permitindo que o caminhante fique na mesma posição a cada passo. Mostraremos que a adição desta nova quiralidade induz uma localização do caminhante na posição inicial do sistema, que converge para um valor finito no regime assintótico. Também mostraremos que essa dinâmica pode ser mais facilmente compreendida se estudarmos a caminhada na base dos autovetores do operador moeda quântica. Já no capítulo 4, estudamos o comportamento de algumas quantidades físicas na vizinhança do ponto de delocalização do sistema, mostrando que essas quantidades satisfazem leis de escalas universais. Além disso, obtemos um resultado analítico para uma quantidade bastante utilizada no estudo das caminhadas quânticas, a razão de participação. Essa expressão servirá para qualquer caminhada quântica que possua as propriedades apresentadas ao longo do texto, sendo válida também para o caso padrão. Por fim, mostramos no capítulo 5 como o efeito de uma dinâmica não-linear afeta o comportamento do caminhante, levando a um novo fenômeno nos estudos de caminhadas quânticas, a irradiação do pacote localizado ao redor da posição original. Essa novo fenômeno segue uma lei de potência, que será apresentada ao longo do texto. Iremos sumarizar nossos resultados no capítulo 6, bem como faremos uma breve perspectiva de trabalhos que podem ser realizados no futuro.

2 Caminhada Quântica Discreta

Vamos inicialmente estudar o comportamento da caminhada quântica discreta em uma rede unidimensional, detalhando a estrutura básica do sistema e suas propriedades, além de funções que detalham a existência de estados localizados na rede. Também veremos como ocorre a transição entre o caso quântico para o caso clássico, além de vermos como essas caminhadas podem ser implementadas em sistemas físicos. Por fim, iremos estudar a adição de efeitos não-lineares na dinâmica do caminhante, mostrando que seu comportamento muda drasticamente.

2.1 Estrutura da caminhada quântica

Como nós vimos no caso do caminhante aleatório clássico, a partícula está situada no espaço das posições e suas instruções serão dadas pela moeda. Após flipar essa moeda, o resultado determinará a direção para qual a partícula irá se mover na rede e, subsequentemente, o deslocamento ocorre. Se o caminhante estiver situado em uma rede unidimensional, os resultados podem ser cara ou coroa, fazendo que o caminhante se mova ou para a esquerda ou para a direita.

Na caminhada quântica discreta, a estrutura é muito similar ao caso clássico. O espaço de Hilbert H_p , associado com as posições da rede discreta, possui dimensão infinita e contável. Desse modo, os estados associados com as posições na rede são dados por $\{|n\rangle\}$, com $n \in \mathbb{Z}$. Entretanto, a ação de flipar a moeda será substituída pela aplicação do operador moeda \hat{C} , que embaralha os graus de liberdade internos do sistema. Portanto, o espaço de Hilbert total do caminhante será dado por um produto tensorial entre esses dois sub-espacos, de modo que:

$$H = H_p \otimes H_c. \quad (2.1)$$

A maioria dos estudos sobre caminhadas quânticas em uma rede unidimensional trabalham com um sistema quântico de dois níveis e, portanto, o sub-espaco H_c será um espaco bidimensional. A base de vetores que gera esse sub-espaco é conhecida como base computacional e é dada por $|\uparrow\rangle = (1, 0)^T$ e $|\downarrow\rangle = (0, 1)^T$, onde T denota a matriz transposta. Assim, o vetor de estado associado ao caminhante será dado por:

$$|\psi\rangle = \sum_n (a_n |\uparrow\rangle + b_n |\downarrow\rangle) \otimes |n\rangle, \quad (2.2)$$

onde o sistema obedece a condição de normalização, dada por $\sum_n (|a_n|^2 + |b_n|^2) = 1$.

Esse sistema bidimensional associado ao operador moeda pode ser qualquer sistema de dois níveis. Portanto, podemos trabalhar com estados de spins $1/2$ de uma partícula, estados polarizados de um fóton, os níveis eletrônicos de um átomo, ou qualquer outro sistema que possua dois níveis.

Para evoluir o caminhante quântico ao longo da rede, faremos o seguinte procedimento: Primeiramente, preparamos o estado inicial da forma $|\psi(t=0)\rangle$; Em seguida, aplicamos o operador moeda \hat{C} para embaralhar os graus de liberdade internos e, por fim, aplicaremos o operador deslocamento condicional \hat{S} , que faz o caminhante se deslocar pela cadeia. Em síntese, podemos determinar um operador unitário relacionado com a evolução do caminhante $\hat{U} = \hat{S} \cdot (\hat{C} \otimes \mathbb{I}_p)$, que será aplicado sucessivas vezes até obter o efeito desejado. Após t passos, o vetor de estado do caminhante será dado por:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}^t |\psi(0)\rangle. \quad (2.3)$$

Agora que já entendemos a estrutura básica do caminhante, vamos estudar um dos casos mais estudados quando tratamos de caminhada quântica unidimensional, o caso da porta quântica Hadamard.

2.2 Caminhada Hadamard

Vamos começar nossa análise partindo da versão mais simples possível da caminhada quântica discreta unidimensional, o caminhante Hadamard. Esse procedimento foi originalmente introduzido por Ambainis et al. (AMBAINIS et al., 2001) e é visto como um análogo quântico do passeio aleatório clássico quando não se é utilizado uma moeda enviesada. A partícula começará na posição de origem, e seu estado inicial pode ser $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ ou qualquer superposição entre esses dois estados. Após a aplicação da moeda Hadamard, o estado do caminhante se transforma de tal forma que:

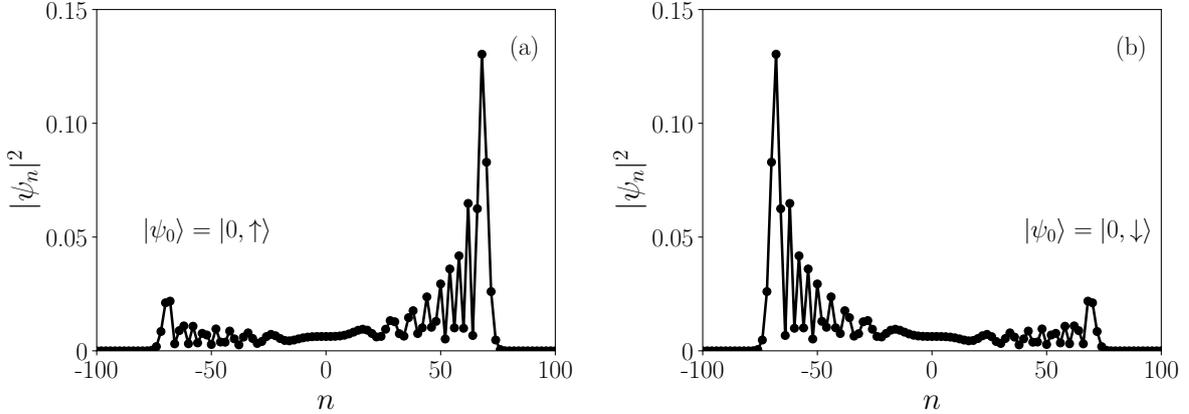
$$\hat{H} |n, \uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n, \uparrow\rangle + |n, \downarrow\rangle), \quad (2.4)$$

$$\hat{H} |n, \downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n, \uparrow\rangle - |n, \downarrow\rangle). \quad (2.5)$$

Após esse embaralhamento, a partícula deverá se mover pela rede de acordo com sua quiralidade. Para isso, o operador deslocamento condicional \hat{S} será aplicado, sendo este definido como:

$$\hat{S} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n-1\rangle\langle n| \otimes |\downarrow\rangle\langle\downarrow| + |n+1\rangle\langle n| \otimes |\uparrow\rangle\langle\uparrow|. \quad (2.6)$$

Figura 3 – Distribuição de probabilidade após 100 passos da caminhada Hadamard para as configurações (a) $|\psi_0\rangle = |0, \uparrow\rangle$ e (b) $|\psi_0\rangle = |0, \downarrow\rangle$. Perceba a clara dependência da distribuição de probabilidade com a escolha do estado inicial



Fonte: Autor - 2021

Portanto, a evolução temporal do caminhante será dada por $\hat{U} = \hat{S}(\hat{H} \otimes \mathbb{I}_p)$, onde \mathbb{I}_p é o operador identidade atuando no espaço de Hilbert H_p . O operador unitário \hat{U} é aplicado sucessivas vezes sem realizar a medição da posição da partícula, pois isso permite que haja interferência entre os estados superpostos do caminhante, resultando em um padrão bastante diferente do obtido no caso clássico. Para detalhar melhor esse efeito, considere um caminhante localizado na posição original $n = 0$ e com grau de liberdade $|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$. A probabilidade de encontrar a partícula na posição $n = \pm 1$ será igual a 50% após o primeiro passo, o que também ocorre no caso clássico. Entretanto, caso não haja medições após o primeiro passo, o efeito da interferência começa a afetar a evolução do caminhante a partir do segundo passo, desviando significativamente do caso clássico e resultando numa variância que escala quadraticamente mais rápido.

Na figura 3, ilustramos a distribuição de probabilidade $|\psi_n|^2$ da caminhada Hadamard após $t = 100$ passos para o estado inicial (a) $|\psi_0\rangle = |0, \uparrow\rangle$, e o estado (b) $|\psi_0\rangle = |0, \downarrow\rangle$. Como podemos ver, há uma clara assimetria entre essas duas distribuições de probabilidades, o que é resultado do operador Hadamard \hat{H} atuar nos estados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ de maneira diferente. Isso se deve a diferença de fase -1 adquirida pelo sistema quando aplicamos \hat{H} no estado $|\downarrow\rangle$. Devido a essa diferença de fase, a distribuição de probabilidade dependerá diretamente da configuração inicial do caminhante, pois haverá um favorecimento de interferências construtivas de um lado da cadeia e interferências destrutivas do outro lado.

Para obtermos uma distribuição totalmente simétrica, como obtivemos na figura 2, devemos escrever o estado inicial como uma superposição de estados da forma

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle \otimes (|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle)]. \quad (2.7)$$

Isso acontece pois a moeda Hadamard não introduz amplitudes complexas no estado do caminhante e, portanto, essa superposição de estados dada na equação 2.7 pode ser interpretada como dois caminhantes independentes, que não interferem entre si.

Algumas propriedades interessantes da caminhada quântica podem ser obtidas quando a exploramos no espaço de Fourier. Essa abordagem foi feita em diversos estudos para a caminhada quântica com dois graus de liberdade (AMBAINIS; KEMPE; RIVOSH, 2004; VENEGAS-ANDRACA, 2012), e também para diversos outros tipos de caminhada (INUI; KONNO; SEGAWA, 2005; INUI; KONISHI; KONNO, 2004; INUI; KONNO, 2005; MACHIDA, 2014). Então, vamos agora explorar algumas dessas propriedades do caminhante Hadamard no espaço de Fourier, que serão úteis na compressão dos problemas discutidos nesse trabalho.

2.2.1 Análise Fourier da Caminhada Hadamard

Para começar a fazer essa análise no espaço de Fourier, iremos escrever a função de onda atribuída ao caminhante na notação de spinor

$$\Psi(n, t) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(n, t) \\ \psi_{\downarrow}(n, t) \end{pmatrix},$$

onde a função $\Psi(n, t)$ pode ser entendida como o vetor das amplitudes da caminhada na posição n e no instante t . Portanto, podemos escrever a equação acima de uma forma alternativa

$$\Psi(n, t) = \psi_{\uparrow}(n, t) |\uparrow\rangle + \psi_{\downarrow}(n, t) |\downarrow\rangle. \quad (2.8)$$

Vamos agora analisar o comportamento da função de onda na posição n e no instante $t + 1$. Para isto, basta aplicarmos o operador unitário \hat{U} nas funções de onda $\Psi(n + 1, t)$ e $\Psi(n - 1, t)$.

$$\begin{aligned} \hat{U}[\Psi(n - 1, t) + \Psi(n + 1, t)] &= \hat{S}\hat{H}[\Psi(n - 1, t) + \Psi(n + 1, t)] \\ &= \hat{S}\hat{H} \left[\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(n - 1, t) \\ \psi_{\downarrow}(n - 1, t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(n + 1, t) \\ \psi_{\downarrow}(n + 1, t) \end{pmatrix} \right]. \end{aligned}$$

Perceba que, ao expandirmos a equação acima, quatro termos irão contribuir para obtermos a função de onda no instante $t + 1$. Assim, ao realizarmos essa expansão, obtemos a seguinte relação de recorrência:

$$\Psi(n, t + 1) = M_+ \Psi(n - 1, t) + M_- \Psi(n + 1, t), \quad (2.9)$$

Aqui, as matrizes M_+ e M_- são:

$$M_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} +1 & +1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

$$M_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ +1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

onde essas matrizes foram obtidas ao realizarmos a transformação unitária na base de estados do espaço de Hilbert $H_p \otimes H_c$.

Nosso objetivo é obter expressões analíticas para as componentes de spinor $\psi_\uparrow(n, t)$ e $\psi_\downarrow(n, t)$, de modo que seja possível relacionarmos o caso discreto com o comportamento contínuo. Então, vamos estudar as propriedades dessa caminhada no espaço de Fourier. Faremos isso de uma maneira idêntica a realizada por Ambainis et al. (AMBAINIS et al., 2001), onde os autores utilizaram uma transformada de Fourier ligeiramente diferente da transformação conhecida

$$\tilde{\Psi}(k, t) = \sum_n \Psi(n, t) e^{ikn}. \quad (2.12)$$

Pela equação 2.9, podemos obter a evolução temporal do caminhante nesse espaço de Fourier. Assim, $\tilde{\Psi}(k, t + 1)$ será obtida por:

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(k, t + 1) &= \sum_n \left[M_+ \Psi(n - 1, t) + M_- \Psi(n + 1, t) \right] e^{ikn} \\ &= e^{ik} M_+ \sum_n \Psi(n - 1, t) e^{ik(n-1)} + e^{-ik} M_- \sum_n \Psi(n + 1, t) e^{ik(n+1)}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde a soma percorrerá todos os sítios da rede. Através da equação dada em 2.12, podemos fazer uma manipulação algébrica da expressão acima e encontrar que $\tilde{\Psi}(k, t + 1)$ será dado por:

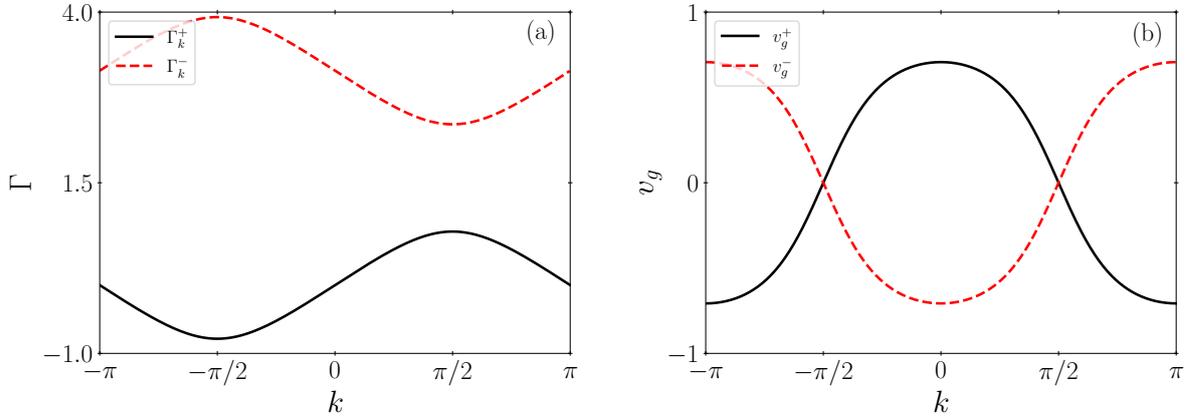
$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(k, t + 1) &= e^{ik} M_+ \tilde{\Psi}(k, t) + e^{-ik} M_- \tilde{\Psi}(k, t) \\ &= \left(e^{ik} M_+ + e^{-ik} M_- \right) \tilde{\Psi}(k, t). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Portanto, a evolução temporal do caminhante no espaço de Fourier será dado por:

$$\tilde{\Psi}(k, t + 1) = \tilde{U} \tilde{\Psi}(k, t), \quad (2.15)$$

onde \tilde{U} é o operador evolução temporal, dado por:

Figura 4 – (a) Estrutura de banda da caminhada Hadamard; (b) Velocidade de grupo correspondentes.



Fonte: Autor - 2021

$$\tilde{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{ik} & e^{ik} \\ e^{-ik} & -e^{-ik} \end{pmatrix}.$$

Como essa matriz \tilde{U} é unitária, podemos decompô-la na base de autovetores desse operador de tal forma que $\tilde{U} = \sum_{i=1}^2 \lambda_k^i |\phi_k^i\rangle \langle \phi_k^i|$, onde λ_k^i são os autovalores e $|\phi_k^i\rangle$ são os auto-estados do sistema. Resolvendo a equação secular, obtemos que os autovalores desse operador são $\lambda_k^1 = e^{i\Gamma_k}$ e $\lambda_k^2 = e^{i(\pi-\Gamma_k)}$, onde Γ_k é um ângulo entre $k \in [-\pi/2, \pi/2]$ e obedece a seguinte expressão

$$\text{sen}\Gamma_k = \frac{\text{sen}k}{\sqrt{2}}. \quad (2.16)$$

Esse ângulo define a relação de dispersão da caminhada Hadamard. Através da abordagem feita acima, podemos determinar um Hamiltoniano associado a evolução do nosso caminhante quântico, de tal modo que suas auto-energias serão $\Gamma_k^+ = \Gamma_k$ e $\Gamma_k^- = \pi - \Gamma_k$. Podemos também encontrar a velocidade de grupo do pacote de onda do caminhante derivando Γ_k com relação ao número de onda k . Após uma certa álgebra, teremos:

$$v_g^\pm = \frac{d\Gamma_k^\pm}{dk} = \pm \frac{\cos k}{\sqrt{2 - \sin^2 k}}. \quad (2.17)$$

Na figura 4(a), plotamos a estrutura de banda do caminhante Hadamard, onde foram obtidas através do hamiltoniano associado. Já na figura 4(b), plotamos a velocidade de grupo de cada uma dessas estruturas. Conforme podemos observar diretamente no gráfico, a velocidade v_g possui valor máximo em $k = 0$, onde obtemos que a velocidade de grupo máxima é igual a $|v_g| = 1/\sqrt{2}$. Isso pode ser facilmente corroborado se derivarmos v_g

em relação a k e igualarmos a zero. Vale a pena mencionar que essa velocidade máxima é a velocidade de propagação dos picos de probabilidade vistos na figura 3, que se propagam balisticamente pela cadeia. Assim, sempre haverá uma probabilidade não-nula de encontrar o caminhante entre as posições dadas pela seguinte relação: $|n| \leq t/\sqrt{2}$, enquanto que não será possível encontrar o caminhante em qualquer outra posição fora desse intervalo.

Essa velocidade de propagação das frentes de onda nos permite introduzirmos o conceito de tempo de impacto (*hitting time*) para as caminhadas quânticas. O tempo de impacto definido em cadeias de Markov clássicas é introduzido como o tempo necessário para o caminhante, partindo de um nó específico, chegar pela primeira vez em outro nó previamente marcado. Essa quantidade é fundamental para o estudo de possíveis implementações em algoritmos baseados no conceito de caminhadas aleatórias clássicas. Entretanto, como o caminhante quântico se encontra em uma superposição de estados ao longo da rede, essa definição não é apropriada para o estudo que estamos realizando. Dentre diversas discussões sobre como definir essa quantidade para caminhadas quânticas discretas, Kempe (KEMPE, 2005) e Kempf e Portugal (KEMPF; PORTUGAL, 2009) introduziram um conceito que é bastante satisfatório para o nosso modelo. Para isso, os autores definiram esse tempo de impacto através da probabilidade de encontrar o caminhante nesse determinado vértice do grafo. Caso essa probabilidade P de encontrar o caminhante nessa posição seja suficientemente grande após transcorrido um intervalo tempo T , então o valor de T será definido como o tempo de impacto. Como vimos, o pico de probabilidade ocorre nas frentes de onda do pacote e, portanto, a velocidade de propagação dessas frentes de onda servem para determinarmos esse tempo de impacto.

Agora que obtivemos os autovalores do operador \tilde{U} , fica fácil determinar os autovetores dessa matriz. Assim, fazendo que $\tilde{U} |\phi_k^i\rangle = \lambda_k^i |\phi_k^i\rangle$, obtemos os autovetores desse operador:

$$|\phi_k^1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N(k)}} \begin{pmatrix} e^{ik} \\ \sqrt{2}e^{i\Gamma_k} - e^{ik} \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

$$|\phi_k^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N(\pi - k)}} \begin{pmatrix} e^{-ik} \\ -\sqrt{2}e^{-i\Gamma_k} + e^{-ik} \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

onde a constante de normalização é dada por:

$$N(k) = 1 + \cos^2 k - \cos k \sqrt{1 + \cos^2 k}.$$

Finalmente, fazendo uma transformada inversa de Fourier ligeiramente da normalmente utilizada, podemos determinar as amplitudes de cada componente spinor (AMBAINIS et al., 2001; VENEGAS-ANDRACA, 2012)

$$\psi_{\uparrow}(n, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\frac{-ie^{ik}}{2\sqrt{1 + \cos^2 k}} \right) e^{-i(\Gamma_k t - kn)} dk, \quad (2.20)$$

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

Dessas relações acima, podemos observar que as amplitudes da função de onda nas posições pares (ímpares) serão nulas nos instantes pares (ímpares). Além disso, algumas outras propriedades fundamentais da caminhada quântica, no limite para o contínuo, podem ser obtidas através dos coeficientes obtidos na equação acima [Para mais detalhes, ver a referência (VENEGAS-ANDRACA, 2012)].

2.3 Generalização do Operador Moeda

Na seção anterior, vimos que a porta quântica Hadamard é considerada uma moeda não enviesada pois, após o primeiro passo, a probabilidade de encontrar a partícula em $n = \pm 1$ é igual a 50%. Entretanto, também é possível construir uma moeda enviesada para a caminhada quântica se explorarmos as propriedades do qubit na esfera de Bloch. Para isso, devemos lembrar que um qubit é um estado do tipo $a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$ e que pode ser visto como um único ponto (θ, ϕ) em uma esfera de Bloch unitária (NIELSEN; CHUANG, 2002), conforme representado na figura 5. Como qualquer operador unitário $U(2)$ pode ser considerado uma porta quântica, iremos utilizar o operador spin em uma direção qualquer, dado por:

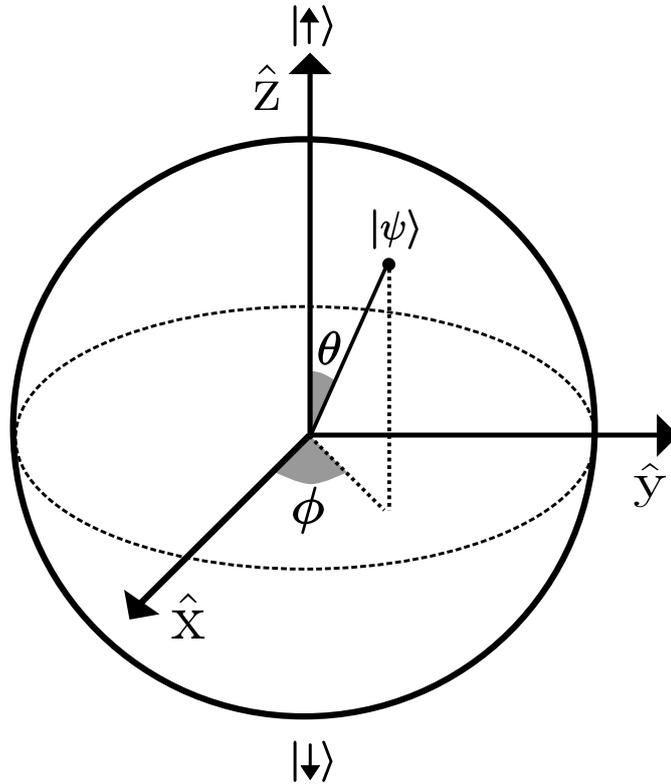
$$\sigma_n = \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}. \quad (2.22)$$

Aqui, $\boldsymbol{\sigma}$ representam as matrizes de Pauli e o vetor $\hat{\mathbf{n}}$ é conhecido como vetor de Bloch, que é dado por $\hat{\mathbf{n}} = (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta)$. Portanto, ao expandirmos a equação 2.22, teremos:

$$\begin{aligned} \sigma_n &= \sigma_x \sin \theta \cos \phi + \sigma_y \sin \theta \sin \phi + \sigma_z \cos \theta \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin \theta \cos \phi + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \sin \theta \sin \phi + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cos \theta. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Esse operador $U(2)$ pode ser entendido como uma rotação do qubit na esfera de Bloch e, portanto, tem a função de embaralhar os graus de liberdade internos do caminhante. Assim, essa porta quântica é considerada um operador moeda generalizado,

Figura 5 – Representação de um qubit via esfera de Bloch.



Fonte: Autor - 2021

sendo uma função dos ângulos (θ, ϕ) da esfera de Bloch. Pela equação acima, podemos ver que \hat{C} tem a forma:

$$\hat{C}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \text{sen} \theta \\ e^{i\phi} \text{sen} \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

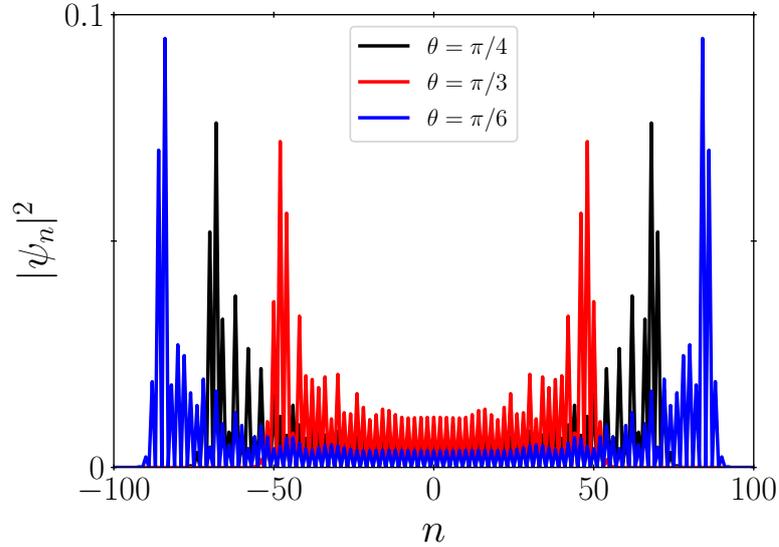
Entretanto, podemos obter qualquer resultado desejado fixando $\phi = 0$ e variando apenas o ângulo θ , recuperando assim a moeda obtida por Nayak e Vishwanath (NAYAK; VISHWANATH, 2000). Isso parece contra-intuitivo a primeira vista mas deve-se ao fato que ou as fases se tornam irrelevantes para a dinâmica do caminhante ou elas podem ser compensadas com a escolha apropriada do estado inicial, como mostrado por Tregenna et al. (TREGENNA et al., 2003). Assim, a moeda mais simples possível será dada por:

$$\hat{C}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \text{sen} \theta \\ \text{sen} \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

onde a dinâmica da caminhada Hadamard será recuperada quando $\theta = \pi/4$.

Para melhor entender porque essa moeda é considerada uma porta quântica generalizada, vamos analisar os casos extremos dessa caminhada. No caso onde $\theta = \pi/2$, o operador \hat{C} dado em 2.25 se reduz a matriz permutação e, portanto, o caminhante possuirá um comportamento oscilatório entre a posição de origem e seus primeiros vizinhos.

Figura 6 – Distribuição de probabilidade para três valores distintos de θ . Observe que a velocidade do caminhante depende diretamente do parâmetro da moeda.



Fonte: Autor - 2021

Entretanto, quando $\theta = 0$, esse operador se reduz a matriz de Pauli σ_z e faz com que não haja mistura entre os graus de liberdade internos do caminhante. Isso faz com que, caso o estado inicial seja da forma $|\psi\rangle = |0, \uparrow\rangle$, o caminhante se desloque apenas para a direita da cadeia. Esses dois casos são considerados os "casos extremos" da caminhada quântica unidimensional e, portanto, ao parametrizarmos a moeda com θ , isso permitirá com que o comportamento da partícula transite entre esses dois extremos de modo suave.

Na figura 6, fixamos $\phi = 0$ e plotamos a distribuição de probabilidade após 100 passos para três valores distintos de θ utilizando a condição simétrica 2.7. Conforme podemos ver, o parâmetro θ determina diretamente a velocidade pela qual o caminhante se propaga ao longo da rede. De fato, após realizarmos um procedimento algébrico similar ao feito na seção anterior, podemos ver que a velocidade máxima do caminhante é $|v_g| = \cos \theta$. Para corroborar com os casos dos limites extremos, temos que se $\theta = 0 \Rightarrow \cos \theta = 1$ e, portanto, o caminhante estará localizado nas posições $n = \pm t$, com probabilidade de 50%. Por outro lado, se $\theta = \pi/2$ então $\cos \theta = 0$ e assim o caminhante não se propagará ao longo da rede.

2.4 Localização em Caminhadas Quânticas

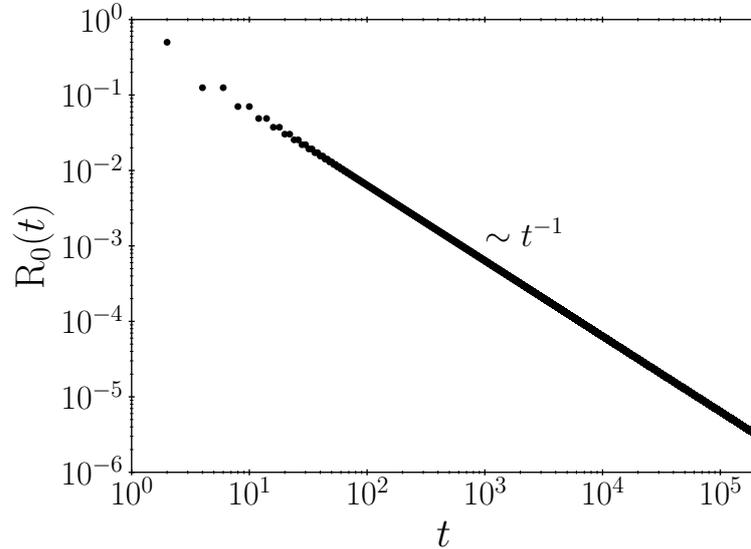
A localização da função de onda é um fenômeno amplamente estudado em física da matéria condensada. O primeiro estudo de localização em sistemas quânticos foi feito por P.W.Anderson (ANDERSON, 1958), onde ele estudou as propriedades de transporte de um elétron em uma rede com desordem estática. Em suas palavras, a localização é "a

ausência de difusão de um estado quântico” e é originada devido a interferência de vários pontos de espalhamento. Desde então, outros fenômenos envolvendo essa localização vem sendo amplamente estudados em física de matéria condensada e em outras sub-áreas da física (MODUGNO, 2010; SEGEV; SILBERBERG; CHRISTODOULIDES, 2013).

Em caminhadas quânticas, existem diversas maneiras de induzir localização no caminhante. Uma das formas é devido a existência de autovetores degenerados quando estamos estudando as propriedades do caminhante no espaço de Fourier, conforme podemos ver em caminhadas quânticas bidimensionais (INUI; KONISHI; KONNO, 2004; MACHIDA; CHANDRASHEKAR, 2015), quando a dimensão do sub-espaço H_c é maior que 2 (INUI; KONNO, 2005) ou em caminhadas quânticas aperiódicas (BUARQUE; DIAS, 2019). A razão para essa localização ocorrer é devido a existência de relações de dispersões independentes do número de onda k , também conhecidas como *flat bands*. Neste caso, a velocidade de grupo v_g vai a zero e, conseqüentemente, o caminhante não se propagará ao longo da rede. A outra maneira de obter localização em caminhadas quânticas é estudando sistemas desordenados. Por exemplo, Chandrashekar (CHANDRASHEKAR, 2011) introduziu um modelo unidimensional onde a moeda é sorteada aleatoriamente a cada passo, simulando um meio desordenado. Essa aleatoriedade na escolha da moeda induzia tanto um padrão difusivo quanto localização no caminhante, dependendo do intervalo onde os parâmetros da moeda serão sorteados. Nesse mesmo trabalho, ele também apresentou um modelo que poderia simular uma caminhada desordenada em condensados de Bose-Einstein, obtendo os mesmos efeitos citados. Outro trabalho, realizado por Pires e Queirós (PIRES; QUEIRÓS, 2020), estudou caminhadas quânticas modificando o operador deslocamento condicional \hat{S} para que o caminhante realize saltos periodicamente, encontrando que certas quantidades utilizadas para indicar a extensão do pacote de onda irão saturar em determinadas sequências, indicando assim uma possível localização do caminhante. Além disso, Mendes et al. (MENDES et al., 2019) estudou a transição entre estados localizados e delocalizados para caminhadas quânticas discretas com desordem de longo alcance. Entretanto, o fenômeno de localização deve ser estudado cuidadosamente em sistemas desordenados, visto que algumas propriedades da caminhada quântica podem ser perdidas, conforme visto por Keating et al. (KEATING et al., 2007).

Nessa seção, iremos introduzir algumas funções que nos permitem detectar tanto a extensão espacial da função de onda quanto a existência de estados localizados no sistema analisado. Para ilustrar o comportamento dessas quantidades no contexto de caminhadas quânticas, iremos estudar a evolução temporal dessas funções para a caminhada Hadamard, mostrando que não existem estados localizados nessa sistema.

Figura 7 – Probabilidade de retorno R_0 em função do tempo para a caminhada Hadamard para uma configuração inicial completamente simétrica. Aqui, vemos que R_0 cai a medida que o caminhante evolui no tempo, mostrando que não há estados armadilhados.



Fonte: Autor - 2021

2.4.1 Probabilidade de Retorno

Uma grandeza comumente utilizada para avaliar se a função de onda está estendida ou localizada pela cadeia é a probabilidade de retorno R_{n_0} , definida na equação 2.26. Para entender melhor essa grandeza, vamos supor que em $t = 0$ a função de onda encontra-se completamente localizada na posição $n_0 = 0$. Se após um tempo infinitamente longo a probabilidade de retorno for nula, então temos um indicativo que a função de onda se estende por toda a rede. Entretanto, caso $R_0 \neq 0$, temos um bom indicativo que uma parcela da função de onda ficará armadilhada na posição de origem.

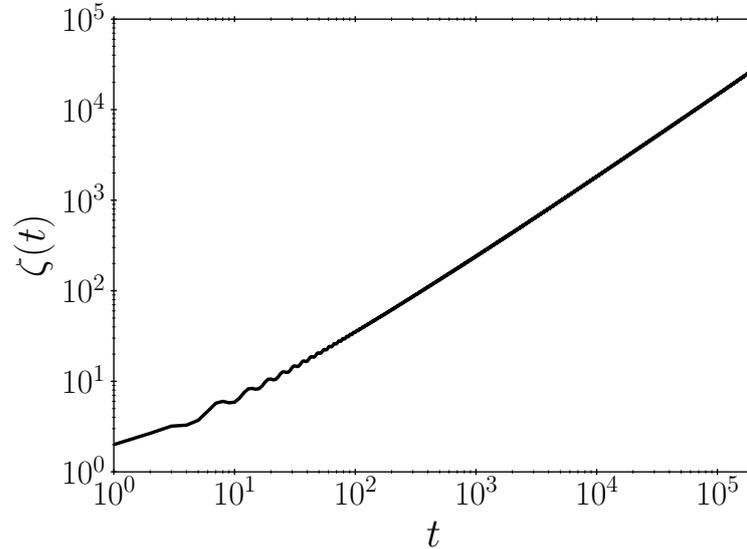
$$R_0(t) = |\psi_0(t)|^2. \quad (2.26)$$

Na figura 7, ilustramos a probabilidade de retorno R_0 em função do número de passos t para a caminhada quântica Hadamard ($\theta = \pi/4$). Aqui, utilizamos o estado inicial totalmente simétrico, dado pela equação 2.7. Conforme ilustrado, R_0 decresce monotonicamente com o número de passos do caminhante, indicando que a caminhada quântica Hadamard não possui estados localizados.

2.4.2 Razão de Participação

Outra grandeza comumente estudada para determinar a existência de estados localizados é a razão de participação ζ (WEGNER, 1980; KRAMER; MACKINNON,

Figura 8 – Razão de participação ζ em função do tempo da caminhada quântica Hadamard para a configuração simétrica. Conforme podemos ver, ζ cresce continuamente com o tempo, indicando a ausência de estados localizados.



Fonte: Autor - 2021

1993), definida como

$$\zeta(t) = \frac{1}{\sum_n |\psi_n(t)|^4}. \quad (2.27)$$

Essa grandeza nos permite obter uma noção do quão estendida a função de onda está ao longo da rede, já que levaremos em conta apenas os sítios onde as amplitudes da função de onda são não-nulas. Para compreendermos melhor como essa grandeza nos dá a informação desejada, faremos alguns exemplos.

No primeiro exemplo, vamos considerar uma função de onda completamente estendida ao longo da cadeia. Tal função de onda é dada por $\psi(n) = \frac{e^{ikn}}{\sqrt{N}}$, onde N é o número total de sítios da cadeia. Assim, a razão de participação será dada por:

$$\zeta = \frac{1}{\sum_n |\psi_n(t)|^4} = \frac{1}{\sum_n |(N^{-1/2})|^4} = \frac{N^2}{N} = N.$$

Já para o caso onde a função de onda está completamente localizada na posição n_0 , a distribuição de amplitudes de $\psi(n)$ será do tipo delta. Assim, a razão de participação será

$$\zeta = \frac{1}{\sum_n |\psi_n(t)|^4} = \frac{1}{\sum_n |\delta_{n_0,n}|^4} = 1.$$

Como podemos ver, quando existem estados localizados no sistema, ζ irá saturar em um valor bem definido, sendo o caso onde $\zeta = 1$ o limite extremo onde a função de

onda está totalmente localizada em uma posição. Por outro lado, caso a participação cresça continuamente a medida que o sistema evolui, não haverá estados localizados do caminhante.

Na figura 8, plotamos a evolução temporal da razão de participação ζ para a caminhada Hadamard com uma configuração totalmente simétrica. Como podemos ver, essa grandeza cresce a medida que o número de passos aumenta, sendo portanto um indicativo que o caminhante se estende pela rede e que não possui estados localizados.

2.4.3 Dispersão

Como estamos estudando medidas para determinar a existência de estados estendidos, é importante termos uma grandeza que nos permita obter o quanto a função de onda se alargou ao lado da rede. Essa grandeza é a dispersão e é definida como:

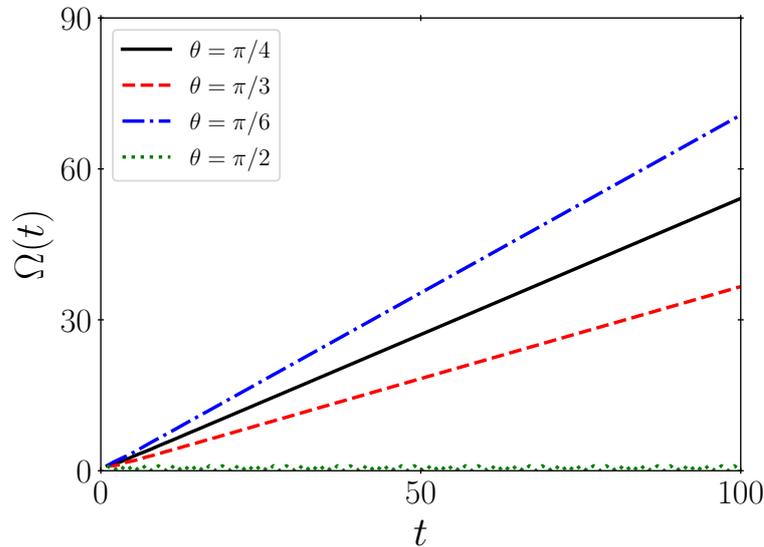
$$\Omega = \sqrt{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2}. \quad (2.28)$$

Usualmente, a dispersão segue uma lei de potência, de tal modo que $\Omega \propto t^\alpha$. Baseado nesse expoente, podemos sintetizar diferentes regimes da função de onda, conforme listados a seguir:

- $\alpha = 0 \rightarrow$ A função de onda está completamente localizada na posição de origem da cadeia;
- $0 < \alpha < 1/2 \rightarrow$ Regime subdifusivo;
- $\alpha = 1/2 \rightarrow$ Regime difusivo;
- $1/2 < \alpha < 1 \rightarrow$ Regime superdifusivo;
- $\alpha = 1 \rightarrow$ Regime balístico;
- $\alpha > 1 \rightarrow$ Regime superbalístico.

Na figura 9, plotamos a evolução temporal de Ω para diversos valores parâmetro θ . Conforme podemos ver, a caminhada quântica exibirá um comportamento balístico ao longo da rede, com o coeficiente angular de Ω dependendo diretamente da escolha de θ . Também podemos observar que, no caso extremo onde o caminhante ficará localizado na posição de origem e em seus primeiros vizinhos ($\theta = \pi/2$), a dispersão não evoluirá temporalmente. Além disso, é importante mencionarmos que, diferentemente do caso quântico, o caminhante aleatório clássico se alargará difusivamente ao longo da rede, conforme ilustrado na figura 2(b).

Figura 9 – Evolução temporal da dispersão Ω para diversos valores do parâmetro θ . Conforme podemos ver, o caminhante se propagará balisticamente ao longo da rede, exceto no caso extremo $\theta = \pi/2$, onde, como o caminhante ficará localizado na posição de origem e em seus primeiros vizinhos, a dispersão Ω não evoluirá temporalmente.



Fonte: Autor - 2021

2.5 Decoerência em caminhadas quânticas

Agora que analisamos algumas propriedades das caminhadas quânticas discretas, uma pergunta surge: Como conectá-las com a caminhada aleatória clássica? Primeiramente, devemos ter em mente que o passeio aleatório clássico é um processo Markoviano, ou seja, não é possível prever com precisão qual será o próximo passo do caminhante, mesmo que se conheça todos os passos anteriores. Isso faz com que a aleatoriedade seja uma propriedade intrínseca da caminhada clássica. No caso quântico, entretanto, podemos ver pela equação 2.3 que o processo é totalmente determinístico, ou seja, sabendo o estado inicial do sistema $|\psi(0)\rangle$ e os operadores que evoluem o caminhante, podemos determinar $|\psi(t)\rangle$ em qualquer instante.

Logo, não há nada de aleatório na caminhada quântica discreta. Assim, como podemos considerar essa caminhada um análogo quântico ao caso aleatório clássico? Essa conexão é realizada através do fenômeno de decoerência, que introduz componentes aleatórias à evolução do caminhante. Quando estamos estudando experimentalmente sistemas quânticos, se eles não estiverem totalmente isolados com o meio externo, as correlações do sistema quântico se transformarão em correlações com esse meio externo, fazendo com que a superposição de estados seja colapsada para um estado bem definido. Portanto, uma das formas de introduzirmos decoerência na caminhada quântica é realizar medições em nosso sistema quântico a cada passo do caminhante, forçando a função de

onda a colapsar em um estado bem definido a cada passo e, portanto, o caminhante se comportará exatamente como o caso clássico. Assim, devido a importância desse fenômeno em sistemas quânticos, é fundamental entendermos a ação da decoerência nas caminhadas quânticas.

Além do entendimento da conexão entre as caminhadas quânticas e o passeio aleatório clássico, a ação da decoerência pode produzir comportamentos interessantíssimos. Para citar um desses estudos, Kendon e Tragenna mostraram (KENDON; TREGENNA, 2003) que a ação de uma pequena quantidade de decoerência pode realçar alguns efeitos da caminhada. Por exemplo, quando estamos tratando de um sistema unidimensional, podemos produzir uma distribuição de probabilidade quase uniforme ao longo da rede, denominada distribuição *top hat*, ainda exibindo o comportamento balístico.

Diversos novos estudos sobre a ação da decoerência em outros modelos de caminhadas quânticas estão sendo apresentados. Para citar um exemplo, a transição quântico-clássico foi recém implementada para a caminhada quântica de três estados a partir da introdução de operadores tipicamente estudados na ação de decoerência em sistemas quânticos (TUDE; OLIVEIRA, 2021). Para uma análise mais aprofundada da ação desse fenômeno nas caminhadas quânticas, Viv Kendon escreveu um artigo de revisão detalhando muitas propriedades desse fenômeno tanto no caso da caminhada contínua quanto no caso discreto (KENDON, 2007).

2.6 Implementações físicas e potenciais aplicações

Estudamos até agora as propriedades da caminhada quântica em um modelo unidimensional, mostrando que ela possui diferenças bastante significativas em relação ao caso clássico. Entretanto, ainda não discutimos como essas propriedades podem ser exploradas tanto em sistemas físicos quanto em problemas computacionais. Esse será o objetivo dessa seção.

Uma das potenciais aplicações da caminhada quântica é na simulação de fenômenos quânticos. Por exemplo, Strauch demonstrou que há uma relação entre as densidades de probabilidade das caminhadas quânticas unidimensionais e a equação linear de Dirac unidimensional (STRAUCH, 2006). Após isso, diversos outros estudos também mostraram essa relação, inclusive para a equação de Dirac não-linear (LEE; KURZYŃSKI; NHA, 2015). Outra potencial aplicação é no desenvolvimento de algoritmos que realizam a busca de um determinado vértice em um grafo, de tal modo que há uma alta probabilidade do caminhante ser encontrado nesse vértice. Um dos primeiros trabalhos envolvendo o conceito de caminhadas quânticas em problemas de busca foi realizado por Shenvi et al. (SHENVI; KEMPE; WHALEY, 2003), onde eles mostraram que um algoritmo baseado em caminhadas quânticas realiza uma busca quadraticamente mais rápida em um hiper-cubo do

que os baseados no conceito de caminhada aleatória clássica. Após isso, Childs e Goldstone (CHILDS; GOLDSTONE, 2004) mostraram que esses algoritmos baseados em caminhadas quânticas podem realizar uma busca de um determinado vértice em grafos d -dimensionais de maneira mais eficiente que os baseados em processos clássicos. Além disso, foi mostrado que ambos os casos de caminhada quântica, contínuo e discreto, podem ser utilizados para realizar computação quântica universal, ou seja, qualquer algoritmo quântico pode ser reformulado em termos de caminhada quântica (CHILDS, 2009; LOVETT et al., 2010).

Além dessas potenciais aplicações, diversos estudos mostrando implementações físicas de caminhadas quânticas foram publicados ao longo dos últimos anos em diversos tipos de sistemas. Uma das principais vantagens é que podemos implementar a dinâmica de uma única partícula em uma rede discreta em sistema ópticos, já que muitas propriedades do caminhante podem ser obtidas através de fenômenos de interferência. Por exemplo, podemos implementar essa caminhada utilizando conceitos de óptica linear, tais como em um tabuleiro óptico de Galton (BOUWMEESTER et al., 1999). Esse conceito será estudado detalhadamente na próxima seção. Outra forma de implementarmos caminhadas quânticas foi proposto por Zou et al. (ZOU; DONG; GUO, 2006), onde eles estudaram o momento angular orbital (M.A.O) de fótons para a realização da caminhada. Nesse modelo, mover de uma posição para a outra é equivalente a mudarmos o M.A.O do fóton, enquanto a ação do operador moeda é performada por um divisor de feixes. Nesse trabalho, os autores não somente estudaram a implementação da caminhada quântica com dois estados, como também propuseram implementar a caminhada quântica de três estados em um modelo unidimensional, apesar desse último ser de difícil realização experimental, com a eficiência decaindo exponencialmente a medida que o número de passos crescem. Posteriormente, Zhang et al. mostraram experimentalmente a realização desse modelo teórico para o caso de dois estados (ZHANG et al., 2007).

Além disso, outras diversas aplicações podem ser encontradas em física do estado sólido, íons e átomos armadilhados, circuitos quântico e diversos outros exemplos. Para um estudo mais aprofundado dessas implementações físicas, Wang e Manouchehri escreveram um livro detalhando essas possíveis aplicações (WANG; MANOUCHEHRI, 2013).

2.7 Não-Linearidade em caminhadas quânticas

Na seção anterior, vimos que as caminhadas quânticas podem ser implementadas, entre vários outros modelos, em sistemas ópticos ou em condensados de Bose-Einstein. Entretanto, conforme vimos na introdução desse trabalho, diversos estudos realizados ao longo dos últimos anos mostraram que efeitos não-lineares exercem um papel fundamental no entendimento de tais sistemas. Além disso, não-linearidades típicas desses sistemas físicos tem a capacidade de otimizar algoritmos de busca quânticos, como mostrado por

Meyer e Wong (MEYER; WONG, 2013; MEYER; WONG, 2014). Portanto, é interessante estudarmos o comportamento das caminhadas quânticas quando efeitos não-lineares são incorporados na dinâmica do caminhante.

Diversas maneiras de estudarmos efeitos da não-linearidades em caminhadas quânticas já foram introduzidas. Por exemplo, Shikano et al. considerou um modelo onde o operador moeda possui uma dependência da função de onda dos primeiros vizinhos no instante anterior (SHIKANO; WADA; HORIKAWA, 2014). Em outro trabalho, Mendonça et al. (MENDONÇA et al., 2020) consideraram uma dinâmica não-unitária do caminhante ao introduzirem uma modificação no operador deslocamento condicional, permitindo o caminhante ficar no mesmo sítio a cada passo. Tal dinâmica revelou-se bastante rica, incluindo uma série de efeitos como, por exemplo, auto-armadilhamento ou caos quântico após um certo valor do parâmetro de não-linearidade.

Possivelmente o modelo de caminhada quântica não-linear mais interessante seja o introduzido por Navarrete et al. (NAVARRETE-BENLLOCH; PÉREZ; ROLDÁN, 2007), onde eles propuseram um tabuleiro óptico de Galton não-linear ao adicionar um operador unitário na dinâmica do sistema, fazendo com que o caminhante adquira uma fase que seja dependente das probabilidades de quiralidades globais $|\psi_{n,c}|^2$, sendo c a componente de quiralidade do sistema e n a posição da rede. Esse modelo, ao qual foi restrito apenas para a caminhada Hadamard, mostrou possuir três fases dinâmicas distintas, cada uma delas sendo atingida conforme variamos o parâmetro de não-linearidade χ . Posteriormente, Molfetta et al. (MOLFETTA; DEBBASCH; BRACHET, 2015) mostrou que essa caminhada pode ser descrita por uma equação de Dirac não-linear, quando estudamos seu comportamento no limite para o contínuo. Variando as portas quânticas, Buarque e Dias (BUARQUE; DIAS, 2020) classificaram os diferentes regimes dinâmicos obtidos nessa caminhada em uma rede unidimensional, mostrando que os efeitos não-lineares induzem um auto-armadilhamento do caminhante ao considerar certas moedas quânticas. Posteriormente, os mesmos autores estudaram as propriedades do sistema ao considerarem uma rede fechada, mostrando novos efeitos dinâmicos (BUARQUE; DIAS, 2021).

Nesta sub-seção, iremos discutir a implementação física da caminhada quântica em um sistema óptico, considerado um análogo óptico do tabuleiro de Galton clássico. Esse modelo servirá para entendermos melhor a caminhada quântica não-linear introduzida por Navarrete et al. (NAVARRETE-BENLLOCH; PÉREZ; ROLDÁN, 2007), que também será discutida ao longo desse texto.

2.7.1 Tabuleiro óptico de Galton não-linear

Como vimos na introdução deste trabalho, o tabuleiro de Galton constitui um modelo para simularmos caminhadas aleatórias clássicas em sistemas unidimensionais. Portanto, podemos pensar em um análogo para a implementação das caminhadas quânticas

em sistemas ópticos, de modo que sirva como um modelo do tabuleiro de Galton óptico. A principal diferença é que, no modelo clássico, o caminhante possuirá uma trajetória bem definida, enquanto que no caso óptico o caminhante poderá ser visto em qualquer local do sistema, se movendo então numa superposição de estados.

Esse modelo foi inicialmente estudado por Bouwmeester et al. (BOUWMEESTER et al., 1999) em um esquema de cavidade ópticas, onde um cristal bi-refringente faz com que o "caminhante" se mova simultaneamente para a esquerda e para a direita. Nessa cavidade óptica, os modos longitudinais serão equidistantes e são dados por $m \in \mathbb{Z}$, conforme ilustrado na figura 10(a). Ao incluirmos um modulador eletro-óptico (M.E.O) dentro dessa cavidade e aumentarmos linearmente a voltagem V_1 do modulador, ocorrerá um cruzamento entre os níveis de energia ortogonais do sistema. A ação desse M.E.O na cavidade pode ser descrito por uma matriz 2×2 , dada por:

$$B_1(t) = \begin{pmatrix} e^{i\phi_1(t)/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_1(t)/2} \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Ao incluirmos na cavidade óptica um segundo modulador, rotacionado em um ângulo de 45° em relação ao primeiro, cada nível cruzado irá se repelir, criando cruzamentos de Landau-Zener. A ação desse operador B_2 será dada por:

$$B_2(t) = \begin{pmatrix} \cos(i\phi_2(t)/2) & -\text{sen}(i\phi_2(t)/2) \\ -\text{sen}(i\phi_2(t)/2) & \cos(i\phi_2(t)/2) \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

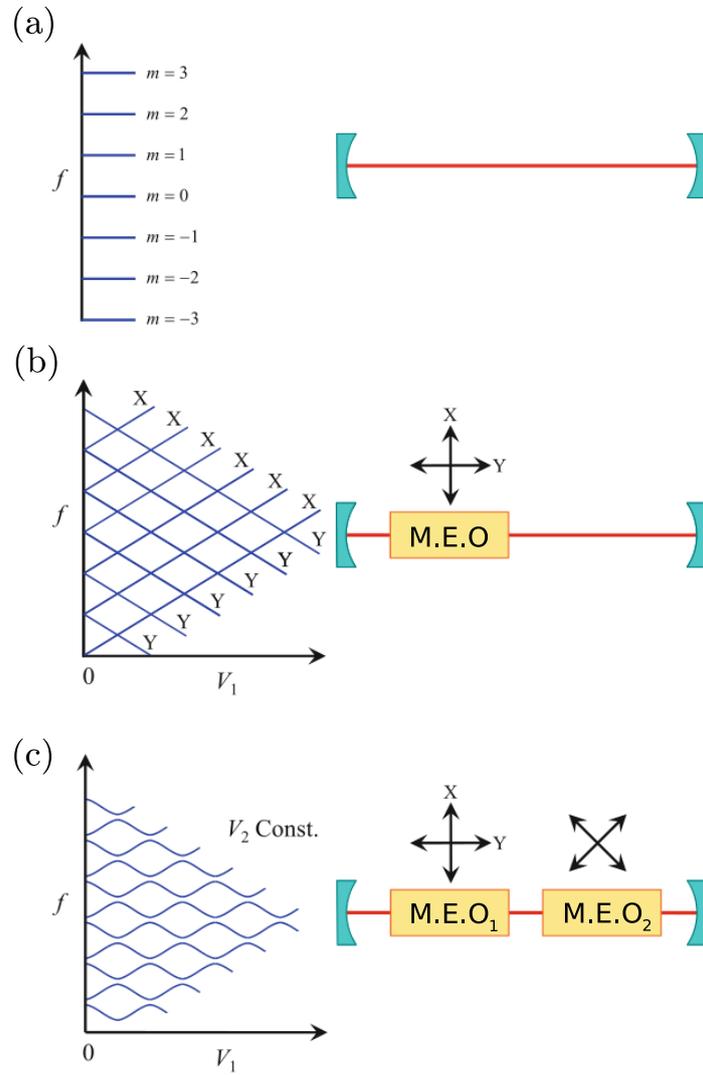
Em seu trabalho, Bouwmeester manteve o potencial V_2 constante, enquanto variou V_1 linearmente, conforme ilustrado na figura 10. Para um sistema como esse, o estado é representado por:

$$|\psi\rangle = \sum_m R_m |m, \uparrow\rangle + L_m |m, \downarrow\rangle, \quad (2.31)$$

onde $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ representam as polarizações do sistema e o estado $|\psi\rangle$ é representará um "cebit", um análogo óptico para o conceito do bit quântico.

Apesar de não terem percebido, os autores propuseram um esquema para a implementação da caminhada quântica em um modelo unidimensional, conforme explicado posteriormente por Knight et al. (KNIGHT; ROLDÁN; SIPE, 2003b). Nesse modelo, os autores notaram que o operador deslocamento condicional será dado por $\hat{S} \equiv B_1(t)^2$, enquanto o operador moeda quântica será dado por $\hat{C} \equiv B_2(t)^2$, fazendo então com que esse modelo seja considerado uma caminhada quântica, onde as posições do sistema são dadas pelas frequências f . Entretanto, os mesmos autores notaram em outro trabalho que uma implementação óptica da caminhada quântica pode ser feita de maneira mais compreensível em diversos outros sistemas ópticos (KNIGHT; ROLDÁN; SIPE, 2003a).

Figura 10 – (a) Modelo de uma cavidade óptica com modos longitudinais m equidistantes; (b) Adicionando um modulador eletro-óptico (M.E.O) ao sistema, haverá o cruzamento dos níveis de energia ortogonais; (c) Esquema de uma cavidade óptica com dois M.E.O rotacionados entre si, de modo que haja os cruzamentos de Landau-Zener.

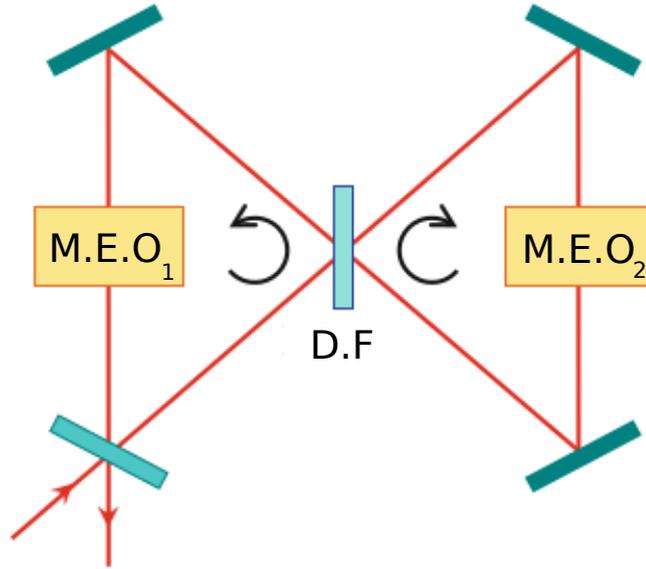


Fonte: Adaptado da referência (WANG; MANOUCHEHRI, 2013).

Um dos modelos propostos foi a implementação da caminhada Hadamard através de um sistema óptico, podendo também ser considerada um tabuleiro óptico de Galton. Entretanto, diferentemente do caso anterior, onde as polarizações fazem o papel do grau de liberdade do sistema, quem fará esse papel será os dois diferentes caminhos que a luz terá dentro da cavidade, com o divisor de feixe (D.F) realizando a operação da moeda Hadamard, enquanto os moduladores eletro-ópticos farão o papel de deslocar a frequência por $\bar{\omega}$, fazendo a função do operador \hat{S} . A implementação da caminhada Hadamard nesse esquema óptico está ilustrada na figura 11.

Tendo esse último modelo em mente, Navarrete et al. (NAVARRETE-BENLLOCH;

Figura 11 – Implementação física da caminhada quântica não-linear em um sistema óptico. Aqui, o divisor de feixes (D.F) atuará como a moeda Hadamard, enquanto que os moduladores eletro-ópticos atuarão como um operador deslocamento condicional, com os graus de liberdade internos sendo representados por cada divisão desse sistema.



Fonte: Adaptado da referência (WANG; MANOUCHEHRI, 2013).

PÉREZ; ROLDÁN, 2007) perguntaram-se o que aconteceria com o caminhante se ele estivesse submetido a um meio não-linear, comumente estudado na óptica. Para se introduzir essa dinâmica não-linear no sistema, basta adicionarmos operadores unitários na evolução do caminhante que tenham dependência da função de onda em instantes anteriores.

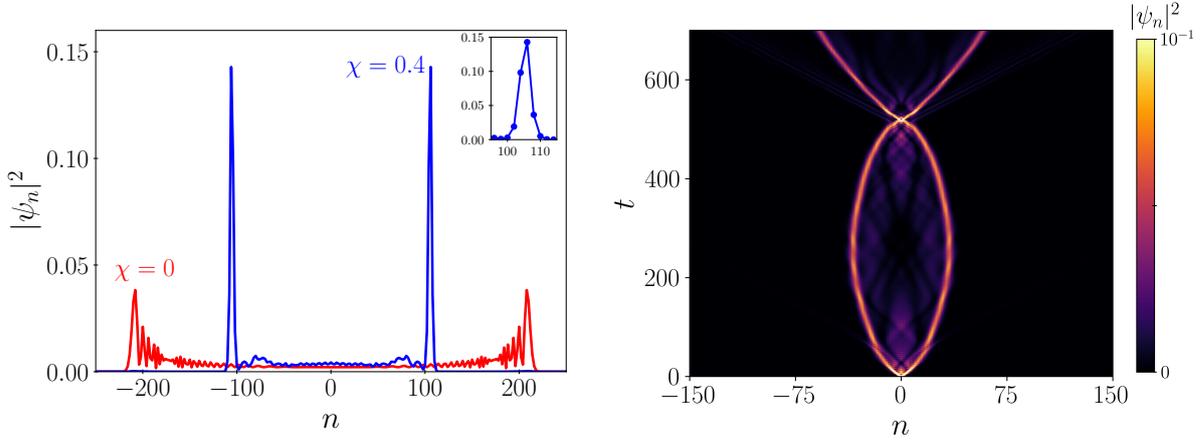
Em seu trabalho, os autores consideraram mais um operador na dinâmica do caminhante, de modo que haja a aquisição de fases que dependem da intensidade do caminhante naquele sítio. Tal operador será dado por:

$$\hat{U}_{nl}^t = \sum_{c=\uparrow,\downarrow} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{iG^t(c,n)} |c\rangle \langle c| \otimes |n\rangle \langle n|, \quad (2.32)$$

onde $G(c, n)$ é uma função arbitrária das probabilidades de quiralidades globais do sistema. Perceba que esse operador mantém a unitariedade do caminhante e o caso linear é recuperado se considerarmos $G(c, n) = 0$.

Nesse trabalho, os autores usaram que $G(c, n) = 2\pi\chi|\psi_{n,c}|^2$, onde χ é o parâmetro de controla o quão não-linear é o sistema, sendo considerado linear quando $\chi = 0$. Portanto, o operador unitário que descreve a dinâmica do caminhante será da forma $\hat{U} = \hat{S}.(\hat{H} \otimes \mathbb{I}_p).\hat{U}_{nl}$, onde \hat{H} é a moeda quântica Hadamard. Após uma certa álgebra, as relações de recorrência do caminhante serão dadas por:

Figura 12 – (a) Comparação entre as distribuições de probabilidades da caminhada quântica linear e não-linear. Perceba que, no regime onde $\chi \neq 0$, pulsos solitônicos são encontrados; (b) Evolução da distribuição de probabilidade da caminhada quântica não-linear para $\chi = 0.49$. Aqui, vemos uma colisão inelástica entre os sólitons.



Fonte: Autor - 2021

$$\psi_{n,\uparrow}^{t+1} = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i2\pi\chi|\psi_{n+1,\uparrow}^t|^2} \psi_{n+1,\uparrow}^t + e^{i2\pi\chi|\psi_{n+1,\downarrow}^t|^2} \psi_{n+1,\downarrow}^t], \quad (2.33)$$

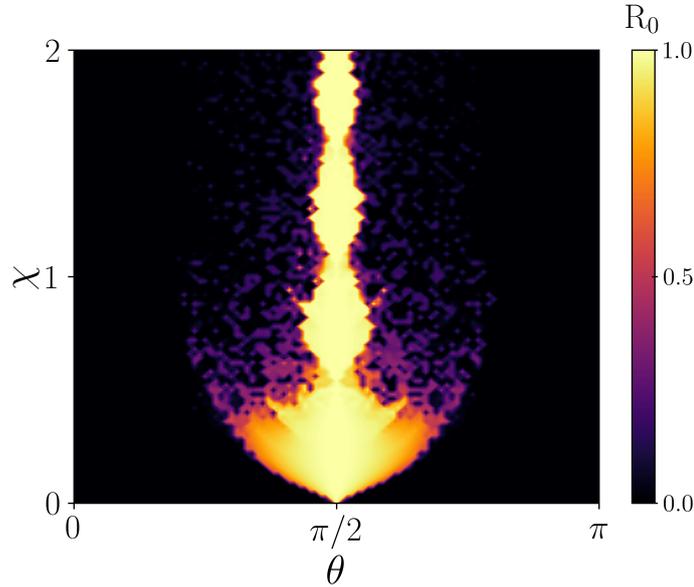
$$\psi_{n,\downarrow}^{t+1} = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i2\pi\chi|\psi_{n-1,\uparrow}^t|^2} \psi_{n-1,\uparrow}^t - e^{i2\pi\chi|\psi_{n-1,\downarrow}^t|^2} \psi_{n-1,\downarrow}^t]. \quad (2.34)$$

Vamos começar o estudo desse sistema ilustrando as distribuições de probabilidade para o caso linear ($\chi = 0.0$) e não-linear ($\chi = 0.4$) na figura 12(a) utilizando a distribuição simétrica. Diferentemente do caso linear, onde o caminhante possui picos de probabilidade que decaem a medida que decorre o tempo, o caso não-linear apresenta pulsos não dispersivos (sólitons)¹. Cada pulso possuirá $\approx 30\%$ da probabilidade total do caminhante e viajarão continuamente ao longo da rede, não perdendo sua forma a medida que o sistema evolui temporalmente. Além disso, os autores notaram a existência de estruturas que interligam esses dois sólitons, denominados pacotes de comunicação.

A velocidade desses sólitons diminui a medida que o parâmetro de não-linearidade χ aumenta, indicando que há outros regimes a medida que aumentamos ainda mais a não-linearidade do sistema. De fato, ao estudarmos o comportamento do caminhante quando $\chi = 0.49$, podemos ver que outros fenômenos ocorrem, conforme ilustrado na figura 12(b). Aqui, vemos que os pacotes de comunicação possuem um papel atrator entre os pulsos solitônicos, de modo que eles começam a se propagar na rede até um determinado número de passos e, após isso, eles retornam até colidirem entre si na posição original. Essa colisão é um processo inelástico, fazendo com que a intensidade desses sólitons caiam

¹ Na realidade, esses pulsos decaem muito lentamente e, por não evoluírem tempo o suficiente, os autores consideraram como não-dispersivos. Entretanto, podemos considerar como pulsos do tipo sóliton para o propósito das seguintes discussões.

Figura 13 – Diagrama da probabilidade de retorno R_0 no plano $\theta \times \chi$ para o estado $|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |\downarrow\rangle$. Perceba que o regime de auto-armadilhamento do caminhante se estabelece ao redor de $\theta = \pi/2$.



Fonte: Autor - 2021

de $\approx 30\%$ para $\approx 24\%$ e, devido a isso, esses pulsos solitônicos não colidem novamente. Aumentando ainda mais a não-linearidade do sistema, outra fase foi observada pelos autores. Essa fase é bastante sensível ao valor de χ e, portanto, os autores a classificaram como uma fase caótica.

Perceba que todos esses comportamentos foram obtidos apenas considerando a porta quântica Hadamard, mostrando que essa caminhada quântica não-linear é bastante rica. Entretanto, o que aconteceria se outras portas quânticas fossem consideradas? Para responder isso, Buarque e Dias (BUARQUE; DIAS, 2020) consideraram a moeda descrita pela equação 2.25. Os autores estudaram detalhadamente as fases dinâmicas do sistema, reportando uma região onde o caminhante ficará armadilhado na posição original. Tal comportamento não aparece quando nos restringimos a moeda Hadamard, sendo possível apenas quando $\theta \rightarrow \pi/2$, conforme ilustrado na figura 13.

Em um trabalho recente, os mesmos autores estudaram as propriedades da coerência quântica do caminhante não-linear generalizado situado em uma rede circular (BUARQUE; DIAS, 2021). Eles preparam um estado de máxima coerência nessa rede, perturbaram com um ruído instantâneo e foram aumentando gradualmente o parâmetro χ . Para não-linearidades baixas, uma dinâmica respiratória irá aparecer no sistema, de modo que a coerência possua oscilações a medida que o tempo passa. Aumentando ainda mais o valor de χ , parte do caminhante ficará armadilhado. Além disso, os autores identificaram que determinadas portas quânticas são mais tolerantes a ruídos que outras, e que essa tolerância também depende do número sítios N do sistema.

3 Caminhada Quântica de Três Estados

Agora que entendemos a dinâmica da caminhada quântica com dois estados, o que aconteceria se houvesse uma probabilidade não nula do caminhante permanecer na mesma posição a cada passo? Quando estamos tratando com o caso da caminhada clássica preguiçosa, a distribuição de probabilidade ainda será uma Gaussiana, semelhante ao caso padrão descrito na introdução. Entretanto, no caso quântico o comportamento do caminhante será totalmente diferente ao adicionarmos um grau de liberdade interno no espaço de Hilbert associado ao operador moeda. Veremos que, nesse caso, haverá uma alta probabilidade do caminhante ficar preso na posição original e em seus primeiros vizinhos, caso a distribuição inicial esteja totalmente localizada nessa posição, algo que não acontecesse no caso clássico.

A análise dessa caminhada foi feita inicialmente por Inui et al. (INUI; KONNO; SEGAWA, 2005), onde eles propuseram um modelo onde o caminhante pode realizar um auto-loop em cada vértice de uma malha unidimensional. Esse modelo pode ser considerado como uma generalização da moeda Hadamard quando o sistema possui três graus de liberdade. Nesse estudo, os autores analisaram as propriedades do caminhante no espaço de Fourier, mostrando que a probabilidade de retorno converge para um valor bem definido, que depende da configuração inicial.

Apesar de ser menos estudada que o caso de dois estados, algumas propriedades interessantes aparecem quando adicionamos uma quiralidade extra no sistema. Talvez uma das mais interessantes, além dessa localização intrínseca, seja uma possível melhoria no desenvolvimento de algoritmos quânticos de busca por um determinado vértice de um grafo, conforme mostrado por Wong et al. (WONG, 2018). Além disso, diversos estudos sobre caminhadas quânticas de três estados estão sendo publicados ao longo desses últimos anos, como a análise de temperatura (TUDE; OLIVEIRA, 2020), a transição entre o comportamento clássico para o quântico (TUDE; OLIVEIRA, 2021) e a implementação da caminhada de três estados em circuitos quânticos (SAHA et al., 2021), para citar alguns exemplos.

Nesse capítulo, iremos introduzir a caminhada quântica discreta de três estados para a moeda de Grover, detalhando as propriedades dessa caminhada no espaço de Fourier. Mostraremos que a localização é devido a degenerescência dos autovetores nesse espaço. Além disso, iremos calcular a probabilidade de retorno R_0 no regime assintótico, mostrando que essa quantidade irá saturar em um valor finito que depende da configuração inicial do caminhante, sendo nula para um estado específico. Posteriormente, iremos obter um operador moeda generalizado através da parametrização dos autovetores do

caminhante de Grover, fazendo com que ele transite entre os comportamentos extremos de maneira contínua. Mostraremos que escrever o estado inicial na base desse caminhante ajudará na compreensão das propriedades bastante importantes do sistema, como a densidade de velocidade de grupo. Além disso, cada autovetor desse possui uma propriedade característica, que serão detalhadas ao longo desse capítulo.

Os resultados obtidos ao longo desse capítulo serão de crucial importância para o entendimento dos principais trabalhos desenvolvidos ao longo desse trabalho, onde avançaremos no entendimento da caminhada quântica de três estados.

3.1 Caminhante Quântico de Grover com Três Estados

Vamos começar detalhando a estrutura básica do caminhante de três estados. Considere uma partícula localizada em uma cadeia unidimensional infinita. O espaço de Hilbert total do sistema pode ser decomposto em um produto tensorial entre dois sub-espacos distintos, ou seja, $H = H_p \otimes H_c$, similarmente ao que já foi introduzido anteriormente. Entretanto, ao adicionarmos uma quiralidade extra no caminhante, o sub-espaco associado ao operador moeda, H_c , será um espaco tri-dimensional, gerado pela base computacional $\{|L\rangle = (1, 0, 0)^T; |S\rangle = (0, 1, 0)^T; |R\rangle = (0, 0, 1)^T\}$, onde símbolo T denota que cada vetor desse é uma matriz coluna 3×1 .

Como estamos tratando de um sistema composto por três graus de liberdade internos, podemos considerar um estado inicialmente localizado na posição n_0 como uma combinação linear dos vetores da base das quiralidades, ou seja, o estado inicial será um qutrit (do inglês *quantum trit*). Esse estado possui a forma:

$$|\psi(t=0)\rangle = (\alpha |L\rangle + \beta |S\rangle + \gamma |R\rangle) \otimes |n_0\rangle. \quad (3.1)$$

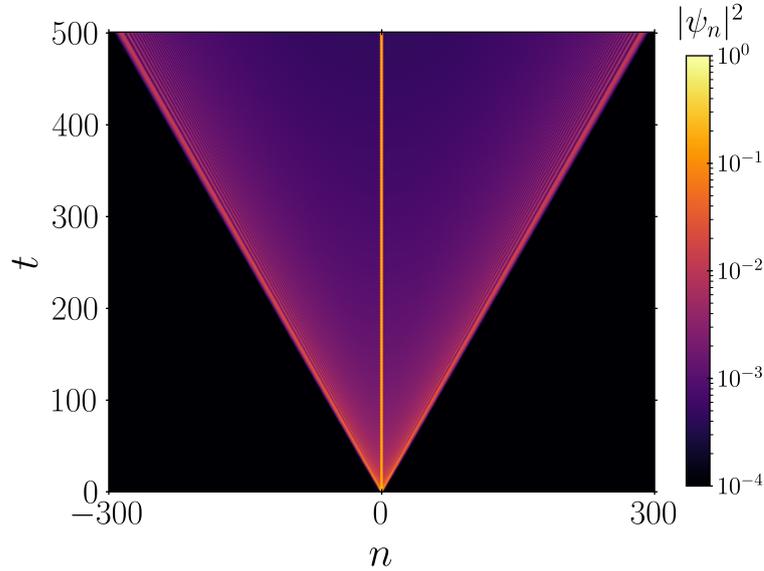
A evolução temporal desse caminhante será dada através de sucessivas aplicações do operador unitário \hat{U} . Portanto, a configuração do caminhante após t passos será obtido através da expressão:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}^t |\psi(0)\rangle, \quad (3.2)$$

onde o operador unitário é da forma $\hat{U} = \hat{S} \cdot [\hat{C} \otimes \mathbb{I}_p]$. Aqui, \hat{S} é o operador deslocamento condicional, \hat{C} é a moeda quântica e \mathbb{I}_p é a matriz identidade no espaco H_p . Diferentemente do caso com dois estados, agora há uma probabilidade não nula do caminhante permanecer na mesma posição. Então, o operador deslocamento condicional \hat{S} será escrito da forma:

$$\hat{S} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n-1\rangle\langle n| \otimes |L\rangle\langle L| + |n\rangle\langle n| \otimes |S\rangle\langle S| + |n+1\rangle\langle n| \otimes |R\rangle\langle R|. \quad (3.3)$$

Figura 14 – Evolução temporal da densidade de probabilidade $|\psi_n|^2$ do caminhante quântico de três estados. Observe que há uma alta probabilidade do caminhante ficar localizado na posição de origem e em seus primeiros vizinhos, enquanto o restante se propaga balisticamente ao longo da rede.



Fonte: Autor - 2021

Já a moeda quântica \hat{C} será, conforme mencionado anteriormente, um operador unitário 3×3 . Iremos utilizar a moeda de Grover, que pode ser vista como uma generalização da porta quântica Hadamard para o caso com três graus de liberdade internos.

$$\hat{C} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Para ilustrar o comportamento dessa caminhante, plotamos a evolução temporal da densidade de probabilidade para uma superposição de estados $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(i|L\rangle + |R\rangle) \otimes |0\rangle$, conforme ilustrado na figura 14. Como podemos ver, há uma forte localização ao redor da posição original do caminhante, que decai exponencialmente a medida que nos afastamos da posição inicial, enquanto que no restante da cadeia possui um comportamento que assemelha ao caso de dois estados, se espalhando balisticamente ao longo da rede. Aqui cada frente de onda se propagará com velocidade $v = 1/\sqrt{3}$.

No capítulo passado, vimos que o comportamento do caminhante pode ser estudado no espaço do Fourier. Portanto, iremos fazer a seguir uma análise detalhada do comportamento da caminhada quântica de três estados nesse espaço, de modo a entendermos melhor a origem da localização no sistema. Essa análise foi feita originalmente por Inui et al. (INUI; KONNO; SEGAWA, 2005) onde, além demonstrar a causa dessa localização, ele mostrou que a probabilidade de retorno irá saturar em um valor finito e que é função

dos coeficientes do estado inicial. Posteriormente, outros estudos dessa caminhada foram realizados no espaço de Fourier, mostrando diversas outras propriedades bastante úteis para o entendimento do caminhante como, por exemplo, a densidade de velocidade de grupo, conforme veremos mais adiante.

3.1.1 Análise de Fourier do Caminhante de Três Estados

Nessa subseção, faremos uma análise similar a que fizemos no capítulo anterior, onde estudamos as propriedades da caminhada Hadamard no espaço de Fourier. Para isso, considere a notação spinor $\Psi(n, t) = [\psi_L(n, t), \psi_S(n, t), \psi_R(n, t)]^T$ como as amplitudes da função de onda da partícula que correspondem a cada quiralidade na posição n e no instante t . Vamos assumir que a condição inicial é do tipo delta na posição $n_0 = 0$, de tal modo que podemos escrever o estado inicial da forma $\Psi(0, 0) = [\alpha, \beta, \gamma]^T$, onde esses parâmetros obedecem a condição de normalização $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 = 1$. A evolução temporal da função de onda será escrita como:

$$\Psi(n, t + 1) = U_L \Psi(n + 1, t) + U_S \Psi(n, t) + U_R \Psi(n - 1, t), \quad (3.5)$$

onde os operadores U_L , U_S e U_R serão dados por:

$$U_L = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

$$U_S = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

$$U_R = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Para descrevermos o comportamento da caminhada no espaço de Fourier, faremos uma transformação similar a realizada no capítulo anterior. Portanto, a função de onda será escrita da forma:

$$\tilde{\Psi}(k, t) = \sum_n \Psi(n, t) e^{ikn}, \quad (3.9)$$

onde $k \in [-\pi, \pi]$. Ao evoluirmos essa expressão, teremos:

$$\begin{aligned}
\tilde{\Psi}(k, t+1) &= \sum_n \left[U_L \Psi(n+1, t) + U_S \Psi(n, t) + U_R \Psi(n-1, t) \right] e^{ikn} \\
&= e^{-ik} U_L \left(\sum_n \Psi(n+1, t) e^{ik(n+1)} \right) + U_S \left(\sum_n \Psi(n, t) e^{ikn} \right) \\
&\quad + e^{ik} U_R \left(\sum_n \Psi(n-1, t) e^{ik(n-1)} \right) \\
&= \left[e^{-ik} U_L + U_S + e^{ik} U_R \right] \tilde{\Psi}(k, t).
\end{aligned}$$

Portanto, a evolução temporal do caminhante será dada por:

$$\tilde{\Psi}(k, t+1) = \tilde{U} \tilde{\Psi}(k, t), \quad (3.10)$$

onde o operador \tilde{U} tem a seguinte forma:

$$\tilde{U} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} e^{-ik} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}.$$

Pela equação 3.10, podemos escrever $\tilde{\Psi}(k, t) = \tilde{U}^t \tilde{\Psi}(k, 0)$. Como \tilde{U} é uma matriz unitária, podemos decompô-la na base dos autovetores, ou seja, escreveremos $\tilde{U} = \sum_{i=1}^3 \lambda_k^i |\phi_k^i\rangle \langle \phi_k^i|$, onde λ_k^i é o autovalor associado ao autovetor $|\phi_k^i\rangle$. Resolvendo a equação secular do sistema, obtemos que os autovalores do operador \tilde{U} são: $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = e^{i\Gamma_k}$ e $\lambda_3 = e^{-i\Gamma_k}$. Aqui, Γ_k é um ângulo definido entre $[-\pi/2, \pi/2]$ e é dado por:

$$\Gamma_k = \pm \arccos \left(-\frac{1}{3}(2 + \cos k) \right). \quad (3.11)$$

Perceba que, diferentemente do caso da moeda Hadamard para dois estados, um dos autovalores de \tilde{U} é independente do vetor de onda k , sendo $\lambda_1 = 1$. Essa degenerescência é essencial para ocorrer o fenômeno de localização, conforme mostrado pelos mesmos autores em (INUI; KONISHI; KONNO, 2004). Entretanto, o que torna entender a caminhada quântica de três estados tão essencial? Se outras caminhadas exibem localização, por quê estudar essa caminhada? De fato, outras caminhadas também exibem esse fenômeno de localização, como a caminhada de Grover bidimensional (INUI; KONISHI; KONNO, 2004) ou até mesmo um caminhante localizado em uma rede unidimensional mas que pode, além de mover-se para seus primeiros vizinhos, pular para seus segundos vizinhos (INUI; KONNO, 2005). Contudo, diferentemente da caminhada de três estados, essas caminhadas possuem dois autovalores que são independentes do valor de k , o que faz a função de onda presa na origem não conflua para um valor finito, oscilando entre dois valores distintos (INUI; KONNO; SEGAWA, 2005). Além disso, podemos estender esse

conceito da caminhada quântica de três estados para grafos mais gerais ao permitir que o caminhante realize auto-loops em cada vértice desse grafo. Esse processo é denominado de caminhada quântica indolente (*lackadaisical quantum walk*) e tem como principal efeito a otimização de algoritmos de busca de um vértice marcado em um determinado grafo com N elementos (GIRI; KOREPIN, 2020; WANG et al., 2017; WONG, 2015; WONG, 2018; HØYER; YU, 2020). Todavia, é importante ter em mente que não é em todos os casos que a caminhada quântica de três estados possuirá uma localização na origem do sistema como, por exemplo, quando estamos estudando o comportamento do caminhante em uma rede bidimensional triangular (KOLLÁR et al., 2010).

3.1.2 Probabilidade de Retorno

Como podemos ver na figura 14, há uma alta probabilidade do caminhante ficar localizado ao redor da posição original. Essa porção que fica presa pode ser calculada, em média, através da seguinte expressão:

$$\bar{P}_\infty(0; \alpha, \beta, \gamma) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{l=1}^3 \sum_{t=0}^{T-1} P_N(0, t; l; \alpha, \beta, \gamma) \right]. \quad (3.12)$$

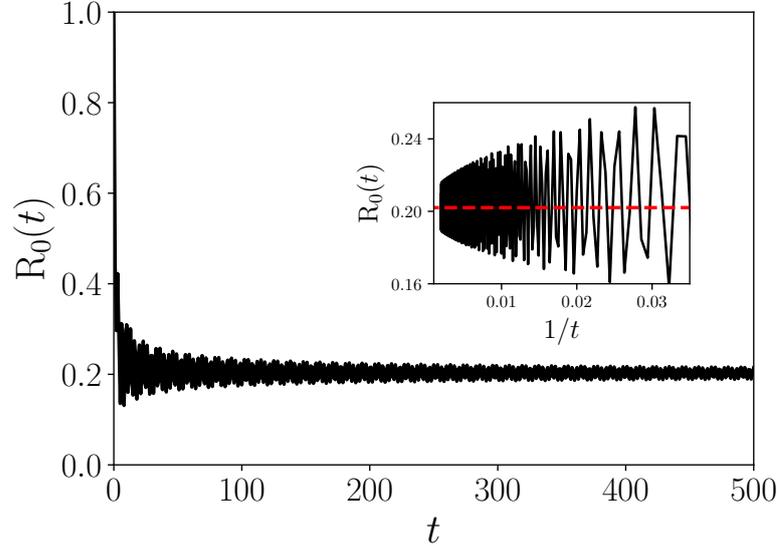
Aqui, $P_N(n, t; l; \alpha, \beta, \gamma)$ é a probabilidade de encontrar a partícula com quiralidade l na posição n e instante t em uma rede circular contendo N sítios. Essa estratégia já foi utilizada anteriormente em estudos de caminhadas quânticas, com a finalidade de demonstrar que o caminhante Hadamard presente em uma rede circular com N sítios, com N sendo ímpar, possuirá uma probabilidade média de $1/N$ de encontrar o caminhante em qualquer um dos sítios da rede após um tempo infinitamente longo, ou em caminhadas bi-dimensionais (INUI; KONNO, 2005). Como a caminhada quântica de três estados possui uma localização intrínseca do sistema, a quantidade definida acima será bastante útil. Entretanto, é importante ter em mente que essa estratégia só permite obter o valor médio da probabilidade de retorno. Para obter o valor preciso onde R_0 irá convergir, Inui et al. (INUI; KONNO; SEGAWA, 2005) e Falkner e Boettcher (FALKNER; BOETTCHER, 2014) utilizaram o lema de Riemann-Lebesgue, juntamente com as análises realizadas no espaço de Fourier (Para mais detalhes, acessar as referências citadas).

Após uma certa álgebra, a probabilidade de encontrar o caminhante na posição original, em média, será dada por:

$$\bar{P}_\infty(0; \alpha, \beta, \gamma) = (5 - 2\sqrt{6})(1 + |\alpha + \beta|^2 + |\beta + \gamma|^2 - 2|\beta|^2). \quad (3.13)$$

É interessante notar que nem sempre essa quantidade irá saturar em um valor diferente de zero. Por exemplo, para a configuração inicial $\alpha = 1/\sqrt{6}$, $\beta = -2/\sqrt{6}$ e

Figura 15 – Probabilidade de retorno em função do número de passos t para a configuração inicial $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(i|L\rangle + |R\rangle)$. Como podemos ver no inset, essa quantidade irá saturar em um valor bem definido após um tempo longo.



Fonte: Autor - 2021

$\gamma = 1/\sqrt{6}$, a probabilidade de encontrar o caminhante na origem irá para zero em um tempo infinitamente longo.

Para mostrar que esse resultado é condizente com a solução numérica, plotamos a evolução temporal da probabilidade de retorno ($R_0 \equiv P(0; \alpha, \beta, \gamma)$) na figura 15 para a mesma configuração utilizada na figura 14. Nesse gráfico, a curva preta ilustra o cálculo numérico de R_0 , enquanto que a curva vermelha é obtida através da expressão dada pela equação 3.13 que, para as configurações utilizadas, será igual a $2(5 - 2\sqrt{6})$. Perceba que as curvas vão convergindo a medida que o caminhante evolui, apesar de pequenas oscilações obtidas quando resolvemos o problema numericamente. No inset, onde plotamos o retorno em função de $1/t$, essa convergência para o valor definitivo fica mais claro, já que as amplitudes da oscilação da curva numérica vão diminuindo a medida que o número de passos aumenta, confluindo para a linha tracejada.

3.2 Generalização do Operador Moeda

No capítulo anterior, vimos a importância de determinar uma moeda generalizada para a caminhada quântica de dois níveis, pois através dessa generalização podemos obter algumas propriedades do caminhante, como a velocidade de suas frentes de onda. Nessa seção, vamos analisar o comportamento do caminhante quântico de três estados para duas moedas especiais, que mostram um perfil semelhante aos casos extremos vistos na seção anterior. Iremos obter os autovetores desses operadores e fazer uma parametrização de modo que haja uma transição contínua entre eles. Com isso em mente, iremos determinar

uma moeda generalizada para a caminhada quântica de três estados que irá preservar as propriedades de localização da moeda de Grover, conforme feito por Štefaňák et al. (ŠTEFAŇÁK; BEZDĚKOVÁ; JEX, 2012). Uma análise similar foi feita para a caminhada quântica bidimensional por Watabe et al. (WATABE et al., 2008), onde mostrou-se que esse operador generalizado 4×4 preserva o mesmo espectro do caminhante de Grover bi-dimensional.

Primeiramente, vamos analisar o comportamento de duas moedas que podem ser entendidas como limites da caminhada quântica de três estados. No caso do caminhante com apenas dois graus de liberdade internos, vimos que a partícula fica completamente localizada entre a origem e seus primeiros vizinhos quando $\theta = \pi/2$, podendo ser considerada uma matriz de permutação entre os dois estados. Já no outro limite, quando cada frente de onda do caminhante se propaga com velocidade $v = \pm 1$, temos uma matriz identidade com um sinal trocado em um dos elementos da diagonal ($\theta = 0$). Com isso em mente, as moedas que iremos analisar possuem um comportamento semelhante a esses casos extremos na caminhada quântica de dois estados.

A primeira moeda que iremos estudar é uma matriz 3×3 semelhante ao operador permutação, apenas com um sinal trocado no elemento da diagonal principal.

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Essa mudança de sinal garante que a moeda \hat{A} possua os mesmos autovalores da matriz dada em 3.4. Apesar dessa mudança no sinal, o comportamento ainda é o mesmo quando aplicamos o operador permutação e, portanto, o caminhante ficará localizado entre a posição original e seus primeiros vizinhos. Já na segunda moeda que iremos analisar, não deve haver mistura entre os graus de liberdade interno do sistema, o que garante que a velocidade do pico presente nas bordas do pacote de onda seja $v \pm 1$. Assim, seja o operador:

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

onde os sinais trocados foram inseridos para manter o mesmo espectro gerado pela moeda de Grover. A dinâmica resultante da moeda 3.15 é bastante simples: Suponha que o estado inicial do caminhante tenha apenas a componente $|L\rangle$ ($|R\rangle$), então não haverá o embaralhamento entre as quiralidades da partícula e assim o caminhante sempre irá se deslocar para a esquerda (direta). Entretanto, se o estado inicial for da forma $|\psi\rangle = |S\rangle \otimes |0\rangle$, o caminhante ficará preso na posição $n_0 = 0$.

Para conectarmos as moedas \hat{A} e \hat{B} com a moeda quântica de Grover, vamos fazer uma parametrização dos autovetores desses operadores, de modo que haja uma transição contínua entre eles. Assim, os autoestados de \hat{A} são:

$$|v_1\rangle = -|S\rangle, \quad (3.16)$$

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle), \quad (3.17)$$

$$|v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle). \quad (3.18)$$

Enquanto que os autovetores de \hat{B} são dados por:

$$|w_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle + |R\rangle), \quad (3.19)$$

$$|w_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle), \quad (3.20)$$

$$|w_3\rangle = |S\rangle. \quad (3.21)$$

Os dois primeiros autovetores correspondem ao autovalor -1 , enquanto o terceiro autovetor corresponde ao autovalor $+1$. Assim, iremos parametrizar os autovetores dados nas equações acima de tal maneira que haja uma mudança contínua entre $v_{1,3} \rightarrow w_{1,3}$, enquanto esses vetores ainda permanecem ortonormais. Note que $v_2 = w_2$ e, portanto, não será necessário realizar a parametrização para esse estado. Então, supondo que a variável ρ realize esse procedimento, os autovetores serão dados por:

$$|\sigma^+\rangle = \sqrt{\frac{1-\rho^2}{2}}|L\rangle + \rho|S\rangle + \sqrt{\frac{1-\rho^2}{2}}|R\rangle, \quad (3.22)$$

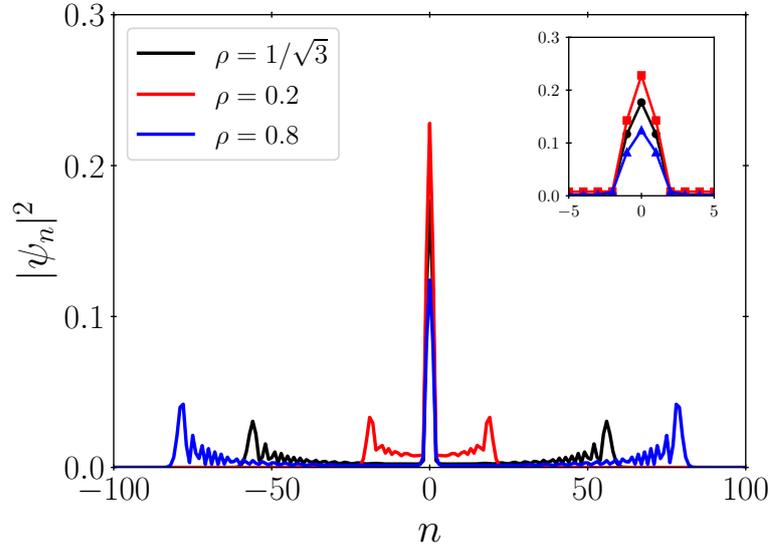
$$|\sigma_1^-\rangle = \frac{\rho}{\sqrt{2}}|L\rangle - \sqrt{1-\rho^2}|S\rangle + \frac{\rho}{\sqrt{2}}|R\rangle, \quad (3.23)$$

$$|\sigma_2^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle), \quad (3.24)$$

onde o superíndice indica o autovalor do sistema. Cada um desses autovetores possuirá uma distribuição de probabilidade característica, como será visto na próxima seção. Uma vez obtido esses autovetores, podemos construir um operador moeda \hat{C} dependendo desse um único parâmetro ρ através da seguinte decomposição espectral:

$$\begin{aligned} \hat{C}(\rho) &= |\sigma^+\rangle\langle\sigma^+| - |\sigma_1^-\rangle\langle\sigma_1^-| - |\sigma_2^-\rangle\langle\sigma_2^-| \\ &= \begin{pmatrix} -\rho^2 & \rho\sqrt{2-2\rho^2} & 1-\rho^2 \\ \rho\sqrt{2-2\rho^2} & 2\rho^2-1 & \rho\sqrt{2-2\rho^2} \\ 1-\rho^2 & \rho\sqrt{2-2\rho^2} & -\rho^2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Figura 16 – Distribuição de probabilidade da caminhada quântica de três estados após 100 passos para três valores distintos do parâmetro ρ .



Fonte: Autor - 2021

Podemos ver que essa moeda transita entre \hat{A} e \hat{B} , com o parâmetro da moeda sendo dado por $\rho \in [0, 1]$ e que o operador de Grover é recuperado quando $\rho = 1/\sqrt{3}$. Para melhor visualizar o papel da moeda na caminhada de três estados, mostramos na figura 16 a distribuição de probabilidade após 100 passos para três valores distintos de ρ . Aqui, utilizamos que a configuração inicial do caminhante é $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(i|L\rangle + |R\rangle)$. Perceba que, assim como no caso de dois estados, o parâmetro da moeda controla diretamente a velocidade que a frente de onda do caminhante se propaga ao longo da rede. Além disso, perceba que a parcela que fica presa na origem tem alguma correlação com o parâmetro ρ , conforme mostrado no inset da mesma figura.

Essa generalização da moeda por um único parâmetro exibe o efeito de localização para qualquer valor de ρ , preservando assim o mesmo espectro do caminhante de Grover. Além disso, o parâmetro da moeda determina diretamente a velocidade do pico da frente de onda, conforme dito anteriormente. Para provar isso, fizemos uma análise semelhante a realizada na seção anterior, onde obtemos a relação de dispersão para a caminhada

$$\Gamma_{1,2}(k, \rho) = \pm \arccos(\rho^2 - 1 - \rho^2 \cos k), \quad (3.26a)$$

$$\Gamma_3(k, \rho) = 0. \quad (3.26b)$$

Observe que uma dessas frequências é independente do vetor de onda k , o que garante a propriedade de localização para a caminhada com essa moeda. Em relação a velocidade do pico de probabilidade, devemos determinar para qual valor do número de

onda a segunda derivada de $\Gamma_{1,2}$ em relação a k vai a zero. Portanto, derivando a expressão dada em 3.26a, obtemos

$$\frac{\partial^2 \Gamma_{1,2}}{\partial^2 k} = \pm \frac{\rho(\rho^2 - 1)\sqrt{1 - \cos k}}{(2 - \rho^2 + \rho^2 \cos k)^{3/2}}. \quad (3.27)$$

Podemos ver que expressão acima é nula quando $k = 0$. Portanto, a velocidade dos picos são dadas por:

$$v_R(\rho) = \lim_{k \rightarrow 0^+} \frac{\partial \Gamma_2}{\partial k} = \rho, \quad (3.28a)$$

$$v_L(\rho) = \lim_{k \rightarrow 0^-} \frac{\partial \Gamma_1}{\partial k} = -\rho. \quad (3.28b)$$

Então, assim como no caso do caminhante quântico com duas quiralidades, o parâmetro da moeda determina diretamente a velocidade dos picos de probabilidade que se propagam na rede, ou seja, após t passos, o pico de probabilidade estará localizado nas posições $n = \pm \rho t$. Além disso, devido a independência de Γ_1 em relação a k , haverá uma alta probabilidade do caminhante estar localizado na posição de origem. Essa moeda, apesar de não ser a única que possui essa propriedade de localização, é uma das mais interessantes de serem analisadas por, além da facilidade de obter suas propriedades, poder ser interpretada como uma caminhada quântica indolente (*lackadaisical quantum walk*) em um espaço uni-dimensional (WONG, 2017; WANG et al., 2017). Tal caminhada é feita adicionando auto-loops em cada vértices do grafo, sendo o parâmetro ρ diretamente relacionado com essa quantidade de loops e tem como principal resultado o boost em algoritmos de busca de um determinado vértice em um grafo geral.

Outra quantidade bastante interessante é a densidade de velocidade de grupo $\omega(\nu)$ que, para o caso de três estados, foi inicialmente introduzida por Falkner e Boetcher (FALKNER; BOETTCHEr, 2014) para a caminhada de Grover e estendida para o caso da moeda generalizada 3.25 por Machida (MACHIDA, 2014)¹. Essa quantidade serve de base para obtermos quantidades fundamentais da caminhada quântica no limite do contínuo. Como exemplo, a distribuição de probabilidade $|\psi_n|^2$ pode ser encontrada por $\omega(\nu)$ reescalado pela quantidade de passos. Pelo trabalho de Machida, a densidade de velocidade de grupo é obtida através da expressão:

$$\omega(\nu) = \frac{\sqrt{1 - \rho^2}(d_0 + d_1\nu + d_2\nu^2)}{2\pi(1 - \nu^2)(\sqrt{\rho^2 - \nu^2})}. \quad (3.29)$$

onde $\nu = n/t$ e os coeficientes d_0 , d_1 e d_2 são dados por:

¹ Machida utilizou uma parametrização por um ângulo θ diferente da realizada na equação 3.25, entretanto a moeda estudada nesse capítulo pode ser recuperada se considerarmos a seguinte relação entre θ e ρ : $\cos \theta = 2\rho^2 - 1$.

$$d_0 = |\alpha + \gamma|^2 + 2|\beta|^2, \quad (3.30)$$

$$d_1 = 2 \left[-|\alpha - \beta|^2 + |\gamma - \beta|^2 - \left(2 - \frac{\sqrt{2 - 2\rho^2}}{\rho} \right) \operatorname{Re}[(\alpha - \gamma)\bar{\beta}] \right], \quad (3.31)$$

$$d_2 = |\alpha|^2 - 2|\beta|^2 + |\gamma|^2 - 2 \left[\frac{\sqrt{2 - 2\rho^2}}{\rho} \operatorname{Re}[(\alpha + \gamma)\bar{\beta}] + \frac{2 - \rho^2}{\rho^2} \operatorname{Re}(\alpha\bar{\gamma}) \right]. \quad (3.32)$$

Aqui, os parâmetros α , β e γ são os coeficientes do estado inicial na base das quiralidades, conforme escrito na equação 3.1. Como veremos a seguir, essa quantidade será de extrema importância para a compreensão das propriedades dos autovetores do operador moeda \hat{C} e, posteriormente, do nosso trabalho.

3.3 Propriedades dos Autovetores na Caminhada Quântica de Três Estados

Vamos estudar agora as propriedades da caminhada quântica de três estados quando reescrevemos o vetor de estado na base de autovetores do operador moeda obtida na equação 3.25. Essa abordagem tem como função facilitar consideravelmente a análise de algumas propriedades da caminhada e foi realizada primeiramente por Štefaňák et al. (ŠTEFAŇÁK; BEZDĚKOVÁ; JEX, 2014). Em outro trabalho, os autores mostraram que esse método pode ser bastante útil quando estudamos duas partículas descorrelacionadas em um modelo unidimensional (ŠTEFAŇÁK et al., 2011). Como um exemplo de como essa transformação pode facilitar na análise, podemos ver que a expressão da densidade de velocidade de grupo, como mostrada na equação 3.29, possui termos bastante complicados quando escrita na base das quiralidades. Veremos nessa seção que tal função será simplificada consideravelmente quando trabalhamos com a nova base, ajudando na compreensão das propriedades do caminhante. Além disso, veremos que cada autovetor possui uma distribuição de probabilidade característica, o que será útil para a compreensão dos trabalhos realizados nesse trabalho.

Conforme vimos nas seções anteriores, o estado inicial é usualmente escrito na base das quiralidades do sistema. Entretanto, podemos realizar uma mudança de base no vetor de estado do caminhante, de tal modo que escreveremos qualquer $|\psi\rangle$ na base dos autovetores do operador moeda, conforme dado a seguir:

$$|\psi\rangle = g_+ |\sigma^+\rangle + g_1 |\sigma_1^-\rangle + g_2 |\sigma_2^-\rangle, \quad (3.33)$$

onde os coeficientes dessa combinação linear obedecem a condição de normalização

$$|g_+|^2 + |g_1|^2 + |g_2|^2 = 1.$$

Os termos utilizado na base das quiralidades podem ser reescritos em função dos novos termos, de tal modo que:

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{1 - \rho^2}g_+ + \rho g_1 + g_2), \quad (3.34)$$

$$\beta = \rho g_+ - \sqrt{1 - \rho^2}g_1, \quad (3.35)$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{1 - \rho^2}g_+ + \rho g_1 - g_2). \quad (3.36)$$

Como vimos no final da seção anterior, a densidade de velocidade de grupo $\omega(\nu)$ é útil para descrever diversas propriedades do caminhante. Portanto, iremos reescrever os parâmetros d_0 , d_1 e d_2 em função dos coeficientes da nova base, de tal modo que a densidade de velocidade de grupo seja dada por:

$$\omega(\nu) = \frac{\sqrt{1 - \rho^2}}{\pi(1 - \nu^2)\sqrt{\rho^2 - \nu^2}} \left[1 - |g_2|^2 - (g_1\bar{g}_2 + \bar{g}_1g_2)\frac{\nu}{\rho} + (|g_1|^2 + 2|g_2|^2 - 1)\frac{\nu^2}{\rho^2} \right]. \quad (3.37)$$

Podemos obter qualquer momento reescalado $\langle \nu^x \rangle$ realizando uma integração no sistema. Em particular, os autores calcularam o segundo momento reescalado e encontraram que essa quantidade depende apenas dos coeficientes dos estados $|\sigma_1^-\rangle$ e $|\sigma_2^-\rangle$, conforme visto a seguir:

$$\langle \nu^2 \rangle = (|g_1|^2 + 1)\Delta_1(\rho) + (|g_2|^2 - 1)\Delta_2(\rho), \quad (3.38)$$

onde $\Delta_1(\rho)$ e $\Delta_2(\rho)$ são dados por:

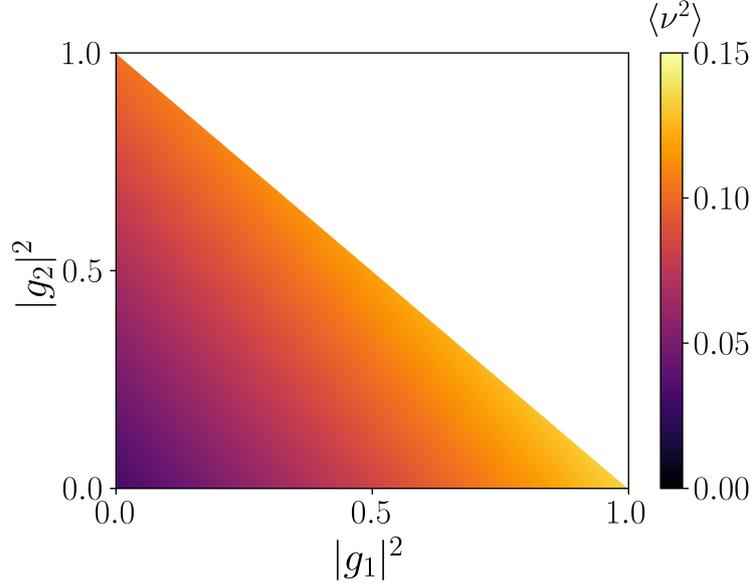
$$\Delta_1(\rho) = \frac{1 + \rho^2 - \sqrt{1 - \rho^2}}{2 + 2\sqrt{1 - \rho^2}},$$

$$\Delta_2(\rho) = \frac{2 - \rho^2 - 2\sqrt{1 - \rho^2}}{\rho^2}.$$

Na figura 17, plotamos um diagrama desse segundo momento reescalado $\langle \nu^2 \rangle$ em função dos coeficientes g_1 e g_2 para o parâmetro da moeda $\rho = 0.5$. Como podemos ver, o estado $|\sigma_1^-\rangle$ possui a maior variância, enquanto que $|\sigma_1^+\rangle$ é a configuração onde $\langle \nu^2 \rangle$ possui valor mínimo. Perceba que isso se deve apenas a forma que as amplitudes da função de onda do caminhante estão distribuídas ao longo da rede, visto que a velocidade das frentes de onda são constantes para um mesmo ρ , conforme mostrado na seção anterior.

Entretanto, é importante mencionar que $\omega(\nu)$ não é suficiente para descrever a distribuição de probabilidade total do caminhante, visto que não leva em conta a parte

Figura 17 – Diagrama do segundo momento reescalado em função dos coeficientes g_1 e g_2 . Como podemos ver, a maior variância é obtida quando apenas o estado $|\sigma_1^-\rangle$ é contabilizado na configuração inicial.



Fonte: Autor - 2021

localizada do sistema, característico da caminhada quântica de três estados. Isso pode ser facilmente constatado ao realizarmos a integração de $\omega(\nu)$ ao longo da rede, de modo que não obedece a condição de normalização. Desse modo, os autores obtiveram a probabilidade de localização, dada por:

$$P_\infty(n) = \begin{cases} \frac{2-2\rho^2}{\rho^4} \mu^{2n} |g_+ + g_2|^2, & n > 0, \\ \frac{1}{\rho^2} |\mu| (|g_+|^2 + (1-\rho^2)|g_2|^2), & n = 0, \\ \frac{2-2\rho^2}{\rho^4} \mu^{2|n|} |g_+ - g_2|^2, & n < 0. \end{cases} \quad (3.39)$$

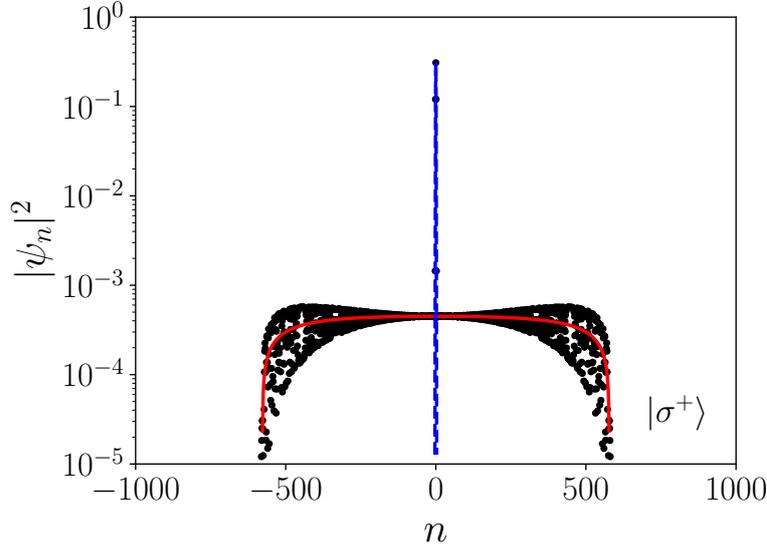
onde μ é uma função de ρ e é dado por:

$$\mu = \frac{-2 + \rho^2 + 2\sqrt{1 - \rho^2}}{\rho^2}. \quad (3.40)$$

Pela equação acima, podemos ver que a probabilidade de retorno pode ser escrita como uma função simples dos coeficientes da combinação linear dos autovetores, dada pela equação 3.33. Já em $n \neq 0$, essa probabilidade de encontrar o caminhante no sítio n decai exponencialmente a medida que se afasta da origem. Perceba que quando consideramos apenas o estado $|\sigma_1^-\rangle$, não há estados localizados e, portanto, a distribuição de probabilidade se assemelha a caminhada quântica de dois estados.

Com isso, podemos ver que a condição de normalização é satisfeita por completo quando consideramos essa parte localizada, conforme visto na equação abaixo:

Figura 18 – Distribuição de probabilidade após 1000 passos para o estado $|\sigma^+\rangle$. Nessa configuração, há uma alta probabilidade do caminhante ficar na origem, enquanto não há divergência em $\nu = \pm\rho$.



Fonte: Autor - 2021

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} P_{\infty}(n) + \int_{-\rho}^{\rho} \omega(\nu) d\nu = 1.$$

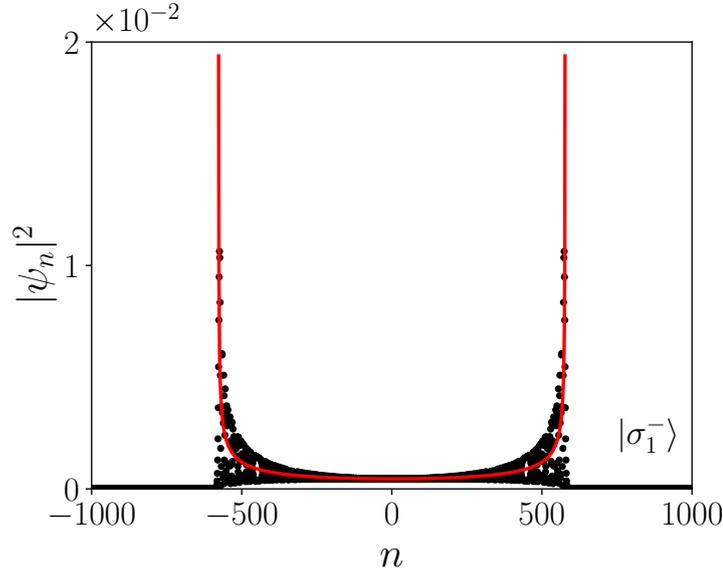
Vamos analisar agora a distribuição de probabilidade para o estado no instante $t = 0$ sendo o autovetor com menor variância, $|\sigma^+\rangle$. Através da equação 3.37, podemos obter uma expressão analítica que descreve a densidade de velocidade de grupo para esse estado.

$$\omega(\nu) = \frac{\sqrt{1-\rho^2}\sqrt{\rho^2-\nu^2}}{\pi\rho^2(1-\nu^2)}. \quad (3.41)$$

Como podemos ver por essa equação, não há divergência em $\omega(\nu)$ nas posições $n = \pm\rho t$. Além disso, pela equação 3.39 podemos ver que há uma alta probabilidade do caminhante ser encontrado na posição original e em sua vizinhança. Essas duas características combinadas fazem que esse caminhante tenha a menor variância entre qualquer configuração possível, ou seja, o motivo desse estado gerar a menor dispersão ao longo da cadeia não está relacionado com a velocidade de propagação do caminhante, e sim com a distribuição espacial da densidade de probabilidade.

Na figura 18, plotamos a distribuição de probabilidade após 1000 passos quando a configuração inicial é $|\sigma^+\rangle$ e $\rho = 1/\sqrt{3}$. Os pontos pretos são resultado do cálculo numérico da distribuição de probabilidade, enquanto que a curva vermelha é a densidade de velocidade de grupo reescalada por t , apresentada na equação 3.41. Além disso, a curva azul representa a parcela localizada do caminhante, que decai exponencialmente a

Figura 19 – Distribuição de probabilidade para o estado $|\sigma_1^-\rangle$ após $t = 1000$. Há uma clara ausência de estados localizados no sistema, bem como uma divergência característica em $\nu = \pm\rho$.



Fonte: Autor - 2021

medida que se afasta da origem. Tal cálculo numérico corrobora com a previsão teórica desenvolvida ao longo desse capítulo.

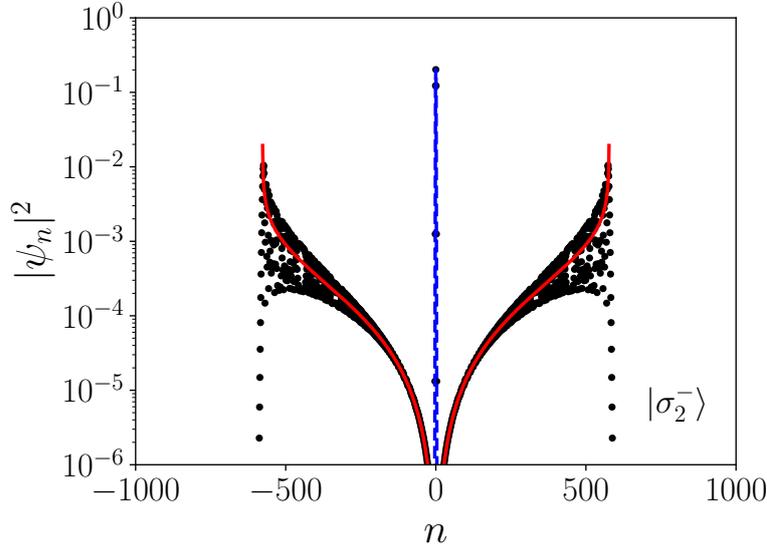
Agora, iremos estudar o comportamento da caminhada quando o estado inicial é o autoestado com maior variância $|\sigma_1^-\rangle$. A primeira coisa que iremos analisar nessa caminhada, é que a probabilidade de localização dada em 3.39 vai a zero no tempo longo pois, ao escrevermos o estado inicial como uma combinação linear dos autovetores, teremos que $g_1 = 1$ e $g_2 = g_+ = 0$. Portanto, a densidade de velocidade de grupo é suficiente para descrever o comportamento assintótico dessa caminhada. Essa relação será dada por:

$$\omega(\nu) = \frac{\sqrt{1 - \rho^2}}{\pi(1 - \nu^2)\sqrt{\rho^2 - \nu^2}}. \quad (3.42)$$

Perceba que agora há divergência em $\nu = \pm\rho$. Portanto, essa ausência de estados localizados juntamente com essa divergência nas bordas fazem com que a distribuição de probabilidade do caminhante obtenha, entre todas as configurações iniciais possíveis, a maior variância. É importante mencionar que esse estado se assemelha ao caso da caminhada de dois estados, no sentido de não haver localização na cadeia, bem como haver divergência nas bordas. De fato, como veremos no próximo capítulo, algumas quantidades fundamentais no estudo da caminhada de dois estados podem também ser obtidas ao usarmos essa configuração inicial.

Na figura 19, plotamos a distribuição de probabilidade para a configuração inicial $|\psi_0\rangle = |\sigma_1^-\rangle$ após $t = 1000$. Conforme podemos visualizar na figura, o comportamento

Figura 20 – Distribuição de probabilidade para o estado $|\sigma_2^-\rangle$ após 1000 passos. Perceba que há uma divergência em $\omega(\nu)$ quando $\nu = \pm\rho$ e que a densidade de velocidade de grupo possui um comportamento muito característico. Além disso, há uma alta probabilidade do caminhante permanecer ao redor da origem.



Fonte: Autor - 2021

dessa caminhada se assemelha ao caso de dois estados, corroborando com o que foi dito no parágrafo acima.

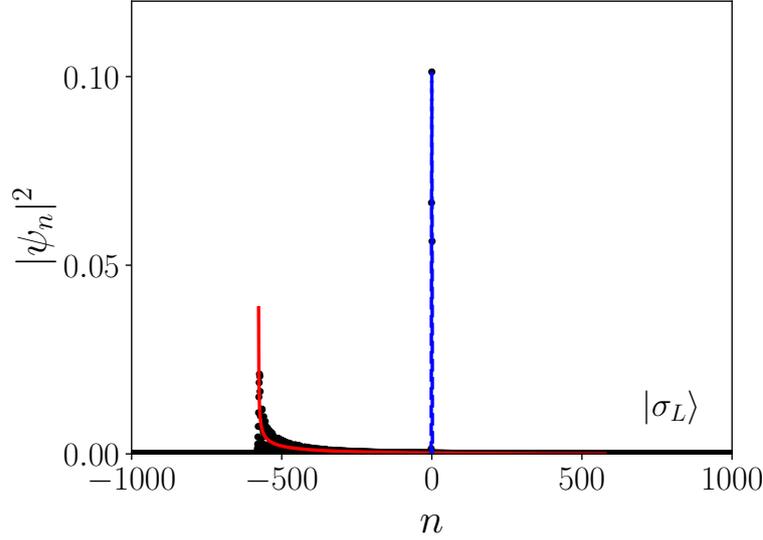
Finalmente, iremos entender o comportamento do autovetor $|\sigma_2^-\rangle$. Pela expressão da equação 3.37, obtemos que a densidade de velocidade de grupo para esse estado é dada por:

$$\omega(\nu) = \frac{\sqrt{1 - \rho^2\nu^2}}{\pi\rho^2(1 - \nu^2)\sqrt{\rho^2 - \nu^2}}. \quad (3.43)$$

Perceba que, assim como no caso anterior, há uma clara divergência nas frentes de onda do caminhante. Entretanto, a presença do termo multiplicativo ν^2/ρ^2 na equação acima gera um comportamento bem diferente do caso anterior. Esse termo garante que, a medida que se aproxima da posição original, a densidade de velocidade de grupo irá a zero, enquanto vai aumentando progressivamente a medida que se afasta dela. Além disso, podemos ver que há uma alta probabilidade do caminhante ficar preso na posição original ou entre seus primeiros vizinhos. Assim, apesar da divergência nas bordas, a parcela localizada garante que o caminhante possua uma variância intermediária entre os estados $|\sigma^+\rangle$ e $|\sigma_1^-\rangle$.

O comportamento para o estado $|\sigma_2^-\rangle$ está ilustrado na figura 20. A distribuição de probabilidade foi calculada através de artifícios numéricos e está ilustrada nos pontos

Figura 21 – Distribuição de probabilidade para o estado $|\sigma_L\rangle$. Perceba que há uma divergência apenas no lado esquerdo da cadeia, gerando uma distribuição de probabilidade bem diferente das demais apresentadas.



Fonte: Autor - 2021

pretos no gráfico, enquanto que a densidade de velocidade de grupo da expressão 3.43 está ilustrada em vermelho e a probabilidade de localização está ilustrado na curva azul. Podemos ver que o comportamento da caminhada se assemelha ao que foi descrito anteriormente.

Além disso, podemos escrever o estado inicial como uma combinação linear qualquer desses autovetores e produzir comportamentos totalmente diferentes dos vistos acima. Assim, seja o estado inicial da forma:

$$|\sigma_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\sigma_1^-\rangle + |\sigma_2^-\rangle \right). \quad (3.44)$$

Utilizando a equação 3.39, juntamente com o estado inicial 3.44, podemos obter uma expressão para a densidade de velocidade de grupo. Portanto, ω será dado por:

$$\omega(\nu) = \frac{\sqrt{(1-\rho^2)}\sqrt{(\rho-\nu)^3}}{2\pi\rho^2(1-\nu^2)\sqrt{\rho+\nu}}. \quad (3.45)$$

Observe que, diferentemente dos casos anteriores, $\omega(\nu)$ possui uma única divergência em $\nu = -\rho$. Isso gerará uma distribuição onde há um único pico de probabilidade na região ao lado esquerdo da cadeia, enquanto que no outro lado ela vai a zero no tempo longo, conforme ilustrado na figura 21.

4 Leis de Escala Universais em Caminhadas Quânticas de Três Estados

Agora que entendemos a dinâmica do caminhante quântico quando o subespaço de Hilbert associado ao operador moeda possui três graus de liberdade interno, vamos analisar o comportamento dessa caminhada escrevendo o estado inicial como uma combinação linear de senos e cossenos, parametrizado por uma variável de estado θ . Definimos o ângulo crítico θ_c como o parâmetro onde o caminhante se assemelha ao comportamento da caminhada quântica com apenas duas quiralidades, e mostramos que a probabilidade de retorno R_0 e a razão de participação ζ satisfazem leis de escalas na vizinhança de θ_c , que são válidas para qualquer parâmetro do operador moeda ρ , sendo portanto consideradas universais na caminhada quântica de três estados. Além disso, nós obtemos uma expressão analítica para a razão de participação ζ quando não há estados localizados no sistema e quando possui singularidades nas bordas da distribuição de probabilidade. Essa expressão é válida para qualquer caminhante quântico que possui esse comportamento, sendo portanto válida para a caminhada de dois estados.

4.1 Modelo Teórico

Vamos considerar que o caminhante quântico está situado em uma rede unidimensional, onde o espaço de Hilbert total do sistema pode ser decomposto em um produto tensorial de dois subespaços, ou seja, $H = H_p \otimes H_c$. Aqui, H_p está associado com os sítios da rede $\{|n\rangle\}$, enquanto que H_c é o espaço tri-dimensional associado aos graus de liberdade internos do sistema. Nesse trabalho, iremos considerar um operador moeda generalizado, obtido pela parametrização dos autovetores da moeda de Grover, conforme mencionado no capítulo anterior.

Neste trabalho, vamos considerar que, inicialmente, a função de onda está completamente localizada na posição inicial $n = 0$. Além disso, vamos escrever a função de onda de tal modo que a evolução temporal do caminhante seja completamente simétrica. Portanto, escrevendo o estado inicial da base das quiralidades, teremos:

$$|\psi(t = 0)\rangle = \left(\frac{\sin \theta}{\sqrt{2}}, \cos \theta, \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} \right). \quad (4.1)$$

Como uma fase global não interfere no comportamento do sistema, vamos considerar que o parâmetro de estado $\theta \in [0, \pi]$. Conforme já vimos no capítulo anterior, o comportamento da caminhada quântica de três estados pode ser mais facilmente compreendida se

escrevermos o estado inicial como uma combinação linear dos autovetores do operador moeda \hat{C} . Assim, para facilitar nossa análise, podemos decompor o estado inicial 4.1 como uma combinação linear dos autovetores de maior e menor variância, de tal forma que $|\psi(t=0)\rangle$ seja escrito da forma:

$$|\psi(t=0)\rangle = g_+ |\sigma^+\rangle + g_1 |\sigma_1^-\rangle, \quad (4.2)$$

onde os coeficientes dessa combinação linear são dados por $g_+ = (\rho \cos \theta + \sqrt{1 - \rho^2} \sin \theta)$ e $g_1 = (\rho \sin \theta - \sqrt{1 - \rho^2} \cos \theta)$. Aqui, vamos definir o ângulo crítico $\theta_c = \arccos(-\sqrt{1 - \rho^2})$ como o parâmetro onde o estado inicial seja igual ao autovetor que produz a maior variância do caminhante, $|\sigma_1^-\rangle$. Essa configuração inicial faz com que a distribuição de probabilidade se assemelhe a caminhada Hadamard com dois graus de liberdade internos e, portanto, não haverá localização em nenhum sítio da rede. Por definição, temos que o ângulo crítico se encontra no segundo quadrante do ciclo trigonométrico e, portanto, $\theta_c \in [\pi/2, \pi]$.

Conforme já vimos no capítulo anterior, a densidade de velocidade de grupo $\omega(\nu)$ não é suficiente para descrever completamente o comportamento da densidade de probabilidade do caminhante quântico de três estados, tendo que também levar em conta a parcela do pacote de onda que fica localizada ao redor da posição inicial. Entretanto, para o estado $|\sigma_1^-\rangle$, a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer sítio da rede é inversamente proporcional ao número de passos t , ou seja, a densidade de velocidade de grupo é suficiente para entender o comportamento assintótico do caminhante. Assim, pela equação 3.42, temos:

$$\omega(\nu) = \frac{\sqrt{1 - \rho^2}}{\pi(1 - \nu^2)\sqrt{\rho^2 - \nu^2}},$$

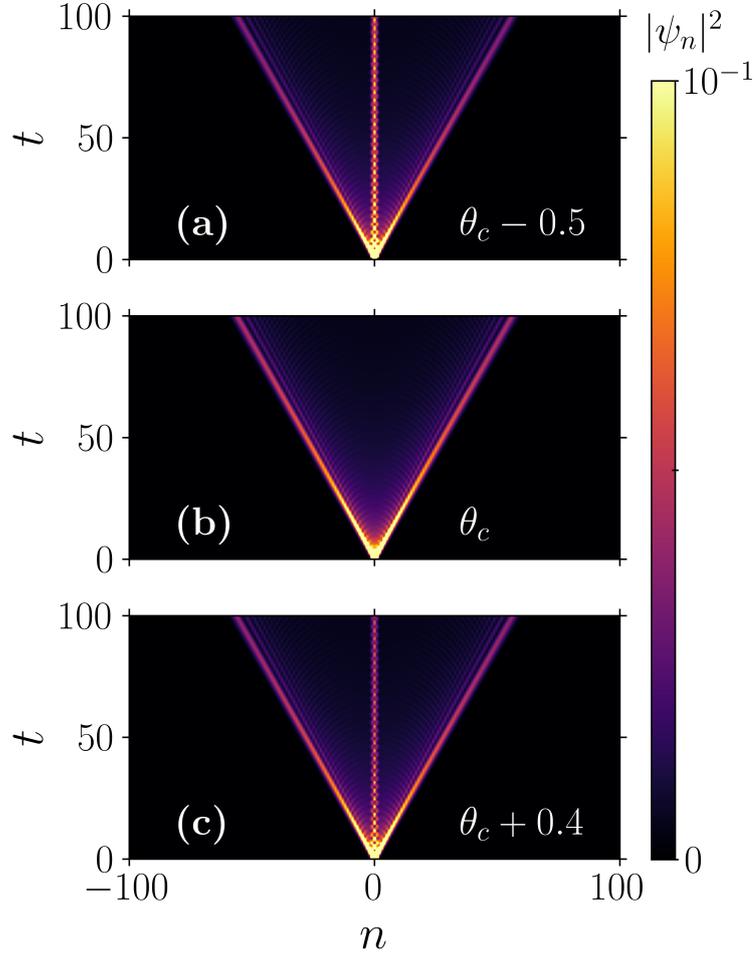
onde $\nu = n/t$. Agora que introduzimos o modelo que será analisado ao longo capítulo, vamos detalhar o comportamento de algumas quantidades físicas que caracterizam a localização no sistema, como a probabilidade de retorno R_0 e a razão de participação ζ .

4.2 Resultados

4.2.1 Análise do Comportamento Assintótico

No seguinte trabalho, vamos considerar que o número de sítios da rede N é grande o suficiente de tal modo que podemos desconsiderar efeitos de borda. Iremos começar nossa discussão ilustrando na figura 22 a evolução temporal da densidade de probabilidade ($|\psi_n|^2$) no plano $n \times t$ para três valores distintos de θ , sendo um deles em $\theta = \theta_c$. Para esse propósito, vamos considerar que o parâmetro do operador moeda ρ recupera o caminhante quântico de Grover, ou seja, $\rho = 1/\sqrt{3}$.

Figura 22 – Evolução temporal da densidade de probabilidade $|\psi_n|^2$ para diversos valores de θ . Observe que, quando $\theta = \theta_c$, não há localização ao redor da posição inicial.

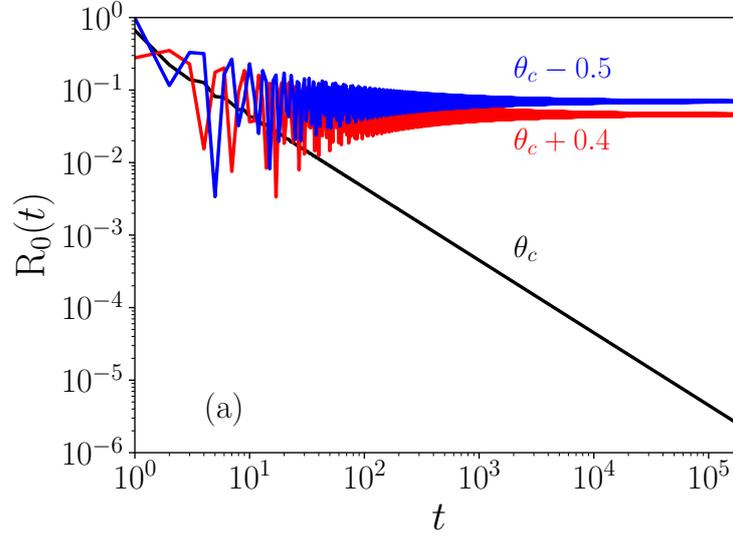


Fonte: Autor - 2021

Conforme podemos ver na figura 22, o pacote de onda claramente delocaliza completamente apenas quando o estado inicial corresponde ao autovetor $|\sigma_1^-\rangle$, i.e, quando $\theta = \theta_c$. Para qualquer outro estado inicial, uma fração do pacote de onda permanece preso na posição inicial e em seus primeiros vizinhos. Esse último comportamento é devido a contribuição de $|\sigma^+\rangle$ na escolha do estado inicial, conforme visto na equação 4.2.

Assim, para caracterizar melhor o comportamento dinâmico da função de onda na vizinhança de θ_c , vamos calcular algumas quantidades físicas que detalham a presença de estados localizados no nosso sistema. Essa componente localizada pode ser bem caracterizada pela probabilidade de retorno R_0 , conforme já foi mencionado anteriormente. No regime assintótico, a probabilidade de retorno irá saturar em um valor finito se o sistema possuir localização na posição original, enquanto que $R_0 \rightarrow 0$ quando o caminhante escapa completamente da posição original $n = 0$. Podemos obter uma expressão analítica para a probabilidade de retorno em função de qualquer valor de θ através da expressão obtida na

Figura 23 – Probabilidade de retorno R_0 em função do tempo para diversos valores de θ . Como podemos ver, R_0 satura em um valor finito para a maioria dos ângulos, com exceção do ângulo $\theta = \theta_c$, onde decai proporcionalmente ao número de passos t .



Fonte: Autor - 2021

equação 3.39

$$R_0(t_\infty) = \frac{|\mu|}{\rho^2} \left[\sin^2\theta + \rho^2 \cos 2\theta + \rho \sqrt{1 - \rho^2 \sin 2\theta} \right], \quad (4.3)$$

onde μ obedece a expressão dada em 3.40.

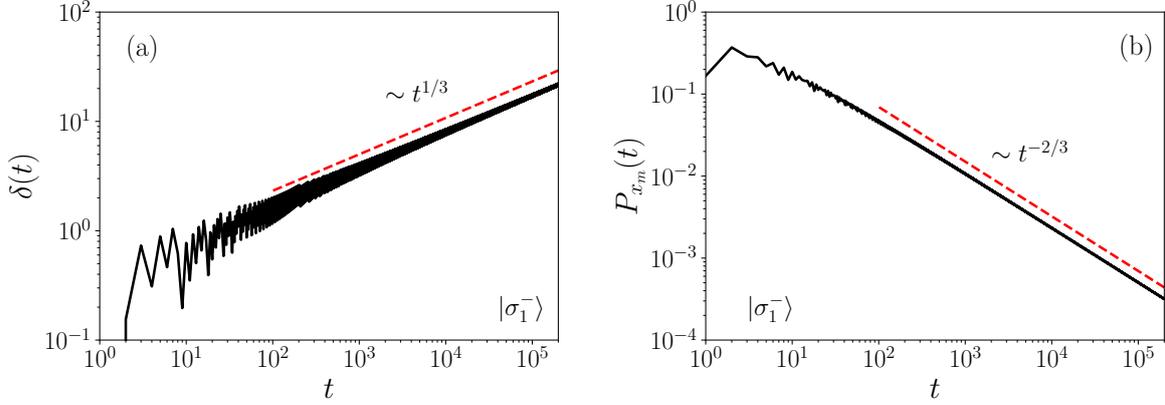
Assim, na figura 23 fizemos a evolução temporal de R_0 para os valores de θ apresentados na figura anterior. Conforme podemos ver, a probabilidade de retorno satura em um valor finito para $\theta \neq \theta_c$, corroborando com o obtido na expressão 4.3. Entretanto, quando estamos no ângulo crítico, a probabilidade de retorno decai diretamente proporcional com o número de passos, i.e., $R_0 \propto t^{-1}$. Isso é totalmente consistente com a teoria mostrada anteriormente, pois a probabilidade no sítio inicial, quando $\theta = \theta_c$, pode ser obtida através de $|\psi_0|^2 = \omega(0)/t$.

Outra quantidade física bastante estudada na caminhada quântica discreta é a razão de participação ζ . Essa quantidade pode ser computada numericamente através da seguinte expressão

$$\zeta(t) = \frac{1}{\sum_n |\psi_n(t)|^4}, \quad (4.4)$$

onde essa soma percorre todos os sítios da rede. Conforme dito anteriormente, sempre que o sistema possuir uma componente localizada, a razão de participação irá convergir para um valor finito, pois essa parte localizada será predominante no cálculo dessa quantidade.

Figura 24 – (a) Evolução sublinear de $\delta(t) = \rho t - n_m$, mostrando que $\delta(t) \propto t^{1/3}$; (b) Evolução temporal da probabilidade do pico da frente de onda P_{n_m} indicando que essa quantidade decai proporcional à $t^{2/3}$.



Fonte: Autor - 2021

Na ausência desses estados característicos, ζ torna-se da ordem da extensão espacial da cadeia, crescendo continuamente com o tempo. Portanto, como o caminhante quântico de três estados possui uma localização intrínseca em $\theta \neq \theta_c$, esperamos que ζ sature no regime assintótico. Entretanto, quando o estado inicial for exatamente $|\sigma_1^- \rangle$, o comportamento assintótico de ζ pode ser obtido ao realizarmos uma certa álgebra. Para isso, considere a razão de participação inversa, dada por:

$$[\zeta(t)]^{-1} = \sum_n |\psi_n|^4 = \sum_n [\omega(\nu)/t]^2. \quad (4.5)$$

Como ρ controla diretamente a velocidade do caminhante, as posições das frentes de onda serão dadas por $n_m = \pm(\rho t - \delta(t))$, onde delta δ é uma correção sublinear positiva, cuja a finalidade é evitar a verdadeira divergência da distribuição da velocidade de grupo $\omega(\nu)$. Esse comportamento sublinear está ilustrado na figura 24(a), onde computamos numericamente que $\delta(t) \propto t^{1/3}$. Através da equação 3.23, temos que $\omega(\nu_m = n_m/t) \propto \sqrt{t/\delta(t)}$, implicando que a probabilidade da frente de onda decairá com $|\psi_{n_m}|^2 \propto t^{-2/3}$, como numericamente evidenciado na figura 24(b). Substituindo a soma em n por uma soma em ν na equação 4.5, teremos:

$$[\zeta(t)]^{-1} = \sum_{\nu=-(\rho-\delta/t)}^{(\rho-\delta/t)} [\omega(\nu)/t]^2, \quad (4.6)$$

onde o somatório agora percorre todos os sítios onde as amplitudes do pacote de onda são não-nulos. Aqui, cada intervalo entre sucessivos valores de ν serão dados por $\Delta\nu = 1/t$. Portanto, no regime assintótico, podemos substituir esse somatório da expressão acima por uma integral, de modo que a razão de participação inversa seja dada por:

$$\begin{aligned}
[\zeta(t)]^{-1} &= \int_{-(\rho-\delta/t)}^{(\rho-\delta/t)} \left[\frac{\omega(\nu)^2}{t} \right] d\nu \\
&= \frac{1-\rho^2}{\pi^2 t} \int_{-(\rho-\delta/t)}^{(\rho-\delta/t)} \frac{d\nu}{(1-\nu^2)^2(\rho^2-\nu^2)}. \tag{4.7}
\end{aligned}$$

A dependência temporal pode ser extraída ao decompor o integrando da equação acima em frações parciais, de modo que:

$$\frac{1}{(1-\nu^2)^2(\rho^2-\nu^2)} = \frac{A}{(1-\nu^2)^2} + \frac{B}{(1-\nu^2)} + \frac{C}{(\rho-\nu)} + \frac{D}{(\rho+\nu)}.$$

Os dois primeiros termos dessa integral convergem para um valor finito a medida que $t \rightarrow \infty$, enquanto o resultado dos dois últimos termos divergem com $\ln(t)$ devido as singularidades da distribuição de velocidade de grupo em $\nu \pm \rho$. Desse modo, o comportamento assintótico da razão de participação será obtida por

$$\zeta(t) = \frac{at}{b + \ln(t)}, \tag{4.8}$$

onde a e b são constantes que dependem do parâmetro da moeda ρ . Esse crescimento linear com a devida correção logarítmica está ilustrado na figura 25 para o caso onde $\rho = 1/\sqrt{3}$. Nesse caso, as constantes que fitam adequadamente a razão de participação são $a = 3.798$ e $b = 1.54$.

É importante ressaltar que a presença dessa correção logarítmica na evolução temporal da razão de participação deve ser levada em consideração cuidadosamente. A convergência para o crescimento da lei de potência final é muito lenta. Assim, é instrutivo escrevermos a razão de participação $\zeta \propto t^{\lambda(t)}$, com o expoente efetivo da lei de potência sendo dado por:

$$\lambda(t) = \frac{d \ln \zeta}{d \ln(t)}. \tag{4.9}$$

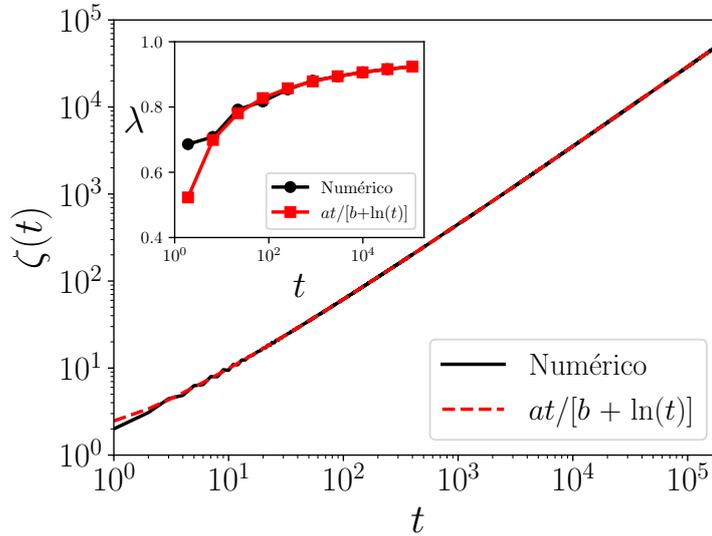
Pela equação 4.8, podemos obter o verdadeiro comportamento desse expoente λ . Assim, $\lambda(t)$ evoluirá da forma:

$$\lambda(t) = 1 - 1/(b + \ln(t)), \tag{4.10}$$

evidenciando que a verdadeira lei de potência desse expoente no regime assintótico é um crescimento linear, já que $1/(b + \ln(t)) \rightarrow 0$ para $t \rightarrow \infty$.

A evolução temporal do expoente efetivo λ foi obtido através de um cálculo numérico da equação 4.4, juntamente com a expressão analítica obtida em 4.8, como mostrado no inset da figura 25, mostrando que o verdadeiro comportamento assintótico

Figura 25 – Evolução temporal da razão de participação ζ para o caminhante de Grover em $\theta = \theta_c$. Aqui, podemos ver que a participação cresce de acordo com a expressão obtida nesse capítulo, $\zeta(\theta_c) = at/[b + \ln(t)]$, com $a = 3.798$ e $b = 1.54$. O inset mostra a dependência temporal do expoente efetivo da lei de potência, evidenciando a lenta convergência para o comportamento linear.



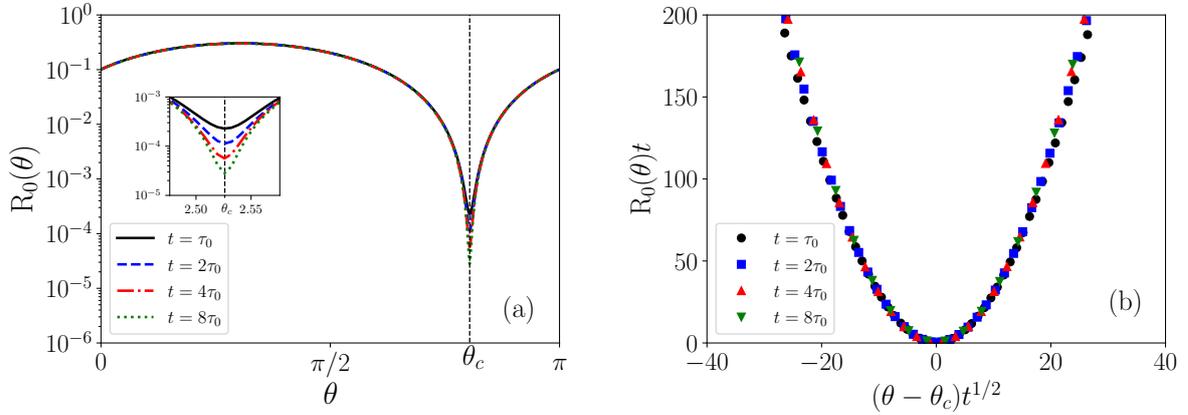
Fonte: Autor - 2021

de ζ é um crescimento linear. De fato, tal correção logarítmica na evolução temporal da razão de participação é geral para caminhadas quânticas que não possuem estados localizados e com uma distribuição assintótica que apresenta singularidades nas frentes de onda do caminhante, conforme apresentado na equação 4.1. Em particular, essa correção logarítmica também está presente em caminhadas quânticas com apenas dois graus de liberdade internos e para a configuração totalmente simétrica. Portanto, é importante enfatizar que a evolução sub-linear de ζ reportada em alguns estudos anteriores, como realizado por Omanakuttan et al. (OMANAKUTTAN; LAKSHMINARAYAN, 2018), é uma estimativa um pouco equivocada da lei de potência efetiva em um curto intervalo de tempo, que é contaminada pela correção logarítmica apresentada no comportamento assintótico obtido nesse trabalho.

4.2.2 Leis de Escala Universais

Agora que entendemos como essas quantidades crescem temporalmente quando estamos no ângulo crítico, iremos analisar o comportamento assintótico dessas quantidades em função da variável de estado θ . Inicialmente, computamos a probabilidade de retorno R_0 em função de θ , cobrindo assim uma grande variedade de estados simétricos. Aqui, plotamos a primeira curva para $\tau_0 = 2000$ passos e fomos dobrando o valor do número de passos até obtermos quatro curvas distintas, conforme ilustrado na figura 26(a). Como esperado, essa quantidade irá saturar em um valor finito para a maioria dos valores de

Figura 26 – (a) Probabilidade de retorno em função de θ para diversos valores de t , onde $\tau_0 = 2000$. Podemos ver que converge rapidamente para um valor finito, exceto na vizinhança do ângulo crítico θ_c ; (b) Colapso dos dados de R_0 na vizinhança do ângulo crítico, mostrando uma lei de escala universal.



Fonte: Autor - 2021

θ , exceto na vizinhança do ângulo crítico θ_c , onde temos que a probabilidade de retorno escala de maneira inversamente proporcional ao número de passos, ou seja, $R_0 \propto t^{-1}$.

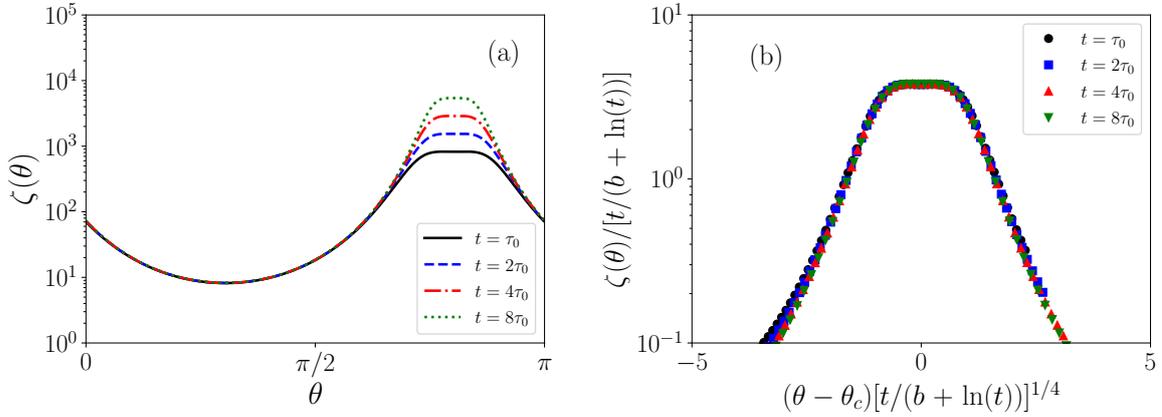
Pelo inset da figura 26(a), podemos visualizar melhor a escala dessa quantidade, onde vemos que o retorno decai de maneira proporcional ao número de passos. Portanto, para corroborar essa lei de escala presente na vizinhança de θ_c , fizemos o colapso dos dados apresentados em uma única curva, explorando o regime assintótico de R_0 . Esse curva está ilustrada na figura 26(b), mostrando que $R_0 \propto (\theta - \theta_c)^2$. Esse comportamento quadrático é uma consequência direta da contribuição do autovetor $|\sigma_1^- \rangle$ na combinação linear apresentada na equação 4.2 quando g_+ vai a zero. Portanto, podemos inferir que a probabilidade de retorno R_0 pode ser escrita em função de um único parâmetro de escala, de tal forma que:

$$R_0(\theta, t) = t^{-1} f[(\theta - \theta_c)t^{1/2}], \quad (4.11)$$

com $f(0)$ sendo uma constante e $f(\eta \gg 1) \propto \eta^2$. Essa dinâmica de escala está bem ilustrada na figura 26(b), onde nós plotamos $R_0 t$ em função da variável de escala $(\theta - \theta_c)t^{1/2}$. O colapso de dados das curvas para distintos intervalos de tempos diferentes corroboram com a forma de escala apresentada acima na vizinhança de θ_c . Essa dinâmica de escala é independente do parâmetro da moeda ρ e, portanto, podemos considerar como uma lei de escala universal para caminhadas quânticas de três estados.

Esse comportamento de escala na vizinhança do ângulo crítico também pode ser obtido se expandirmos em série de Taylor a expressão de $R_0(\theta)$ encontrado na equação 4.3. Para isso, faremos:

Figura 27 – (a) Razão de participação ζ em função da variável de estado θ para diversos valores de t , onde $\tau_c = 2000$; (b) Colapso dos dados de $\zeta(\theta)$ na vizinhança do ângulo crítico, revelando outra lei de escala universal para o caminhante quântico de três estados.



Fonte: Autor - 2021

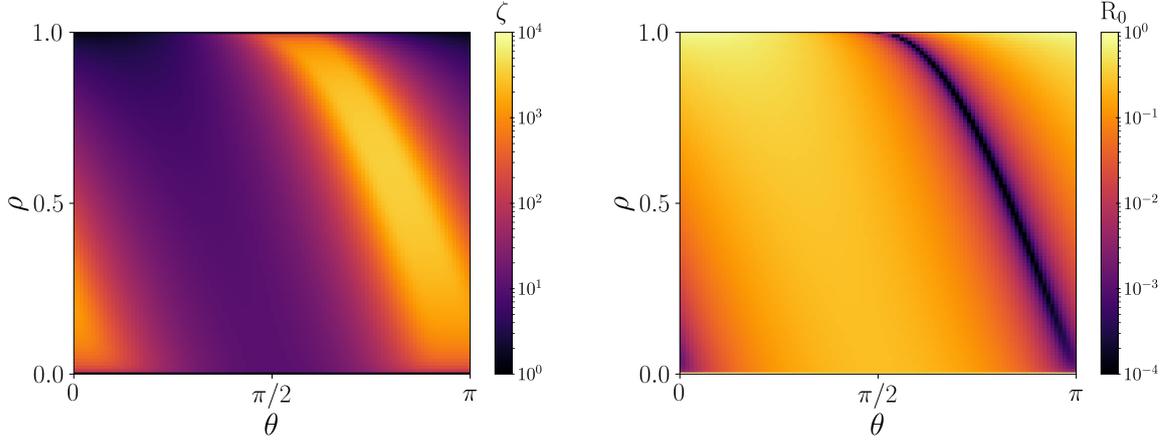
$$\begin{aligned} R_0(\theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{R_0^{(l)}(\theta_c)}{l!} (\theta - \theta_c)^l \\ &= R_0(\theta_c) + \frac{R_0'(\theta_c)}{1!} (\theta - \theta_c) + \frac{R_0''(\theta_c)}{2!} (\theta - \theta_c)^2 + \dots \end{aligned} \quad (4.12)$$

Aqui, temos que $R_0'(\theta_c)$ e $R_0''(\theta_c)$ representam, respectivamente, a primeira e segunda derivada da probabilidade de retorno em relação a θ . Conforme vimos, quando o caminhante se encontra no ângulo crítico, a probabilidade de retorno R_0 é nula. Além disso, é um valor mínimo do sistema e, portanto, a primeira derivada com relação a θ também será nula. Assim, na vizinhança do ângulo crítico, a probabilidade de retorno se reduz a uma função proporcional ao quadrado de $(\theta - \theta_c)$ acompanhada de uma constante multiplicativa, o que corrobora com o resultado obtido na equação 4.11.

Fizemos uma análise similar para a razão de participação ζ , conforme ilustrado na figura 27. Devido a presença de estados localizados, a razão de participação irá saturar na maioria dos valores de θ , já que a parcela da função de onda que fica armadilhada ao redor da posição $n = 0$ se torna predominante no cálculo de ζ . Entretanto, quando a variável de estado é igual ao ângulo crítico, a participação escala no tempo com a devida correção logarítmica apresentada na expressão 4.8.

Assim, podemos determinar como a quantidade ζ escala na vizinhança de θ_c . No regime de tempo longo, ζ deve divergir de tal modo que $\zeta \propto (\theta - \theta_c)^{-4}$ a medida que se aproxima do parâmetro crítico. Assim como a probabilidade de retorno, a razão de participação também pode ser escrita em função de um único parâmetro de escala, que

Figura 28 – (a) Razão de participação ζ normalizada no plano $\rho \times \theta$, atingindo seu valor máximo no caminhante quântico de Grover; (b) Diagrama da probabilidade de retorno R_0 no plano $\rho \times \theta$. Perceba que, em ambas as figuras, o comportamento assintótico de ambas as quantidades físicas analisadas escalam da maneira que foi reportada nesse capítulo.



Fonte: Autor - 2021

incorpora tanto o comportamento em θ_c quanto em sua vizinhança

$$\zeta(\theta, t) = \tilde{t}g[(\theta - \theta_c)\tilde{t}^{1/4}], \quad (4.13)$$

onde $\tilde{t} = t/[b + \ln(t)]$, $g(0)$ é uma constante e $g(\eta \gg 1) \propto \eta^{-4}$. Os dados de ζ apresentados na figura 27(a) podem ser colapsados em uma única curva, como ilustrado no gráfico 27(b). Aqui, nós plotamos ζ/\tilde{t} em função da variável de escala $(\theta - \theta_c)\tilde{t}^{1/4}$. Como podemos ver, o colapso desses dados é bastante preciso, dando suporte a nossa hipótese de escala dinâmica com um único parâmetro e o quanto a correção logarítmica é importante na escala temporal.

Para concluirmos nosso trabalho, vamos analisar a dependência das funções analisadas com relação ao parâmetro da moeda ρ e da variável de estado θ . Para isso, evoluímos temporalmente ambas as quantidades até $t = 10^4$ passos e fizemos um diagrama no plano $\rho \times \theta$. Na figura 28(a), ilustramos o comportamento da razão de participação ζ nesse plano. Conforme podemos ver, ζ satura em um valor finito para a maioria dos valores de ρ e θ , enquanto que apresenta uma faixa colorida na região $\theta \in [\pi/2, \pi]$. Essa faixa colorida se encontra justamente na vizinhança de θ_c , caracterizando o regime onde a participação escala de acordo com a equação 4.11, onde se encontra ausência de estados localizados. Além disso, o grau de delocalização do pacote é não uniforme, atingindo seu valor máximo quando $\rho = 1/\sqrt{3}$. Já na figura 28(b), plotamos a probabilidade de retorno no diagrama $\rho \times \theta$ para o tempo longo. Conforme podemos ver, $R_0 \rightarrow 0$ na vizinhança de θ_c , enquanto que nos outros valores a probabilidade de retorno satura em um determinado valor, corroborando com as outras análises feitas ao longo desse capítulo. Ambas as figuras apresentam as leis de escalas discutidas nos parágrafos anteriores para qualquer valor de ρ

e, portanto, podemos considerar que essas leis de escalas são universais em caminhadas quânticas de três estados.

Essa análise de escala temporal discutida nesse capítulo pode ser estendida para outros modelos de caminhadas quânticas, até mesmo aquelas cuja dinâmica está bem estabelecida, podendo revelar assim novos comportamentos interessantes no estudo das caminhadas quânticas. Isso pode ser de grande interesse no desenvolvimento de novos algoritmos, visto que a moeda utilizada aqui é semelhante a estudada em caminhadas quânticas indolentes, que podem otimizar algoritmos computacionais. A busca de leis de escalas universais também podem ser de grande interesse na associação com Hamiltonianos de sistemas quânticos, podendo ajudar na implementação física das caminhadas quânticas.

Agora que detalhamos o comportamento dinâmico da caminhada quântica de três estados nos capítulos 3 e 4, a seguinte pergunta surge: O que aconteceria se introduzirmos um operador que simula efeitos não-lineares na dinâmica da caminhada? Será que seu comportamento muda substancialmente? Responderemos essas perguntas no capítulo a seguir, onde iremos estudar detalhadamente como esse novo operador irá alterar as propriedades do caminhante e, em especial, o pulso localizado ao redor da origem.

5 Não-Linearidade em Caminhadas Quânticas de Três Estados

No final do capítulo dois, vimos que ao introduzir um operador não-linear na evolução do caminhante quântico de dois estados, a dinâmica irá se alterar significativamente. Em especial, quando restrito apenas a porta quântica Hadamard, Navarrete et al. obtiveram uma série de fenômenos físicos como, por exemplo, colisões entre sólitons ou comportamento caótico (NAVARRETE-BENLLOCH; PÉREZ; ROLDÁN, 2007). Após isso, mostrou-se que modificar o parâmetro da moeda pode levar a novos fenômenos, como o auto-armadilhamento no caminhante na posição original (BUARQUE; DIAS, 2020).

Todos os estudos de dinâmica não-linear em caminhadas quânticas, citados até o presente momento, o sub-espaço do operador moeda é um espaço bidimensional. Entretanto, o que aconteceria se considerarmos um caminhante quântico de três estados não-linear? Com o intuito de respondermos essa pergunta, iremos introduzir uma não-linearidade semelhante ao modelo do tabuleiro óptico de Galton não-linear, onde foram adicionadas fases que dependem da probabilidade de quiralidade global do sistema. Nesse capítulo, veremos que a dinâmica do pulso armadilhado ao redor da posição original muda drasticamente em relação ao caso linear, levando a um novo fenômeno no contexto das caminhadas quânticas discretas, a irradiação desse pulso armadilhado para toda a cadeia.

Portanto, iremos analisar essa dinâmica de irradiação através da probabilidade de retorno R_0 e da razão de participação ζ . Veremos que esse fenômeno ocorre após um tempo transiente τ_c e que, após esse tempo, a probabilidade de retorno cai com a raiz quadrada do número de passos t . Além disso, iremos calcular esse tempo de escape τ_c em função do parâmetro de não-linearidade, mostrando que essa curva depende diretamente do estado inicial da caminhada.

5.1 Modelo Teórico

Neste trabalho, iremos considerar um caminhante situado em uma rede discreta e unidimensional. Portanto, como já vimos nos capítulos anteriores, o espaço de Hilbert total do sistema será dada por $H = H_p \otimes H_c$. Aqui, vamos nos ater apenas ao caminhante quântico de Grover, considerado um operador Hadamard generalizado para a caminhada

de três estados. Portanto, o operador moeda quântica será dado por:

$$\hat{C} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Além disso, com o intuito de introduzirmos efeitos não-lineares na dinâmica da caminhada, aplicaremos um operador que fará com que o caminhante adquira uma fase que é uma função da probabilidade de quiralidade global a cada passo. Tal operador já foi utilizada em diversos estudos envolvendo não-linearidades em caminhadas quânticas discretas com apenas dois graus de liberdades (NAVARRETE-BENLLOCH; PÉREZ; ROLDÁN, 2007; BUARQUE; DIAS, 2020; MOLFETTA; DEBBASCH; BRACHET, 2015; BUARQUE; DIAS, 2021), como visto anteriormente. Assim, estendendo para o modelo de três estados, esse operador não-linear \hat{U}_{nl} será dado por:

$$\hat{U}_{nl}^t = \sum_{c=L,S,R} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{iG^t(c,n)} |c\rangle \langle c| \otimes |n\rangle \langle n|, \quad (5.2)$$

onde $G^t(c, n)$ é uma função arbitrária, que depende da componente spinor da função de onda do caminhante. Aqui, utilizaremos $G^t(c, n) = 2\pi\chi|\psi_{c,n}|^2$, onde o parâmetro χ é uma constante que controla o quão forte os efeitos não-lineares atuarão no sistema. Portanto, o operador unitário que evolui o caminhante será dado por $\hat{U} = \hat{S} \cdot [\hat{C} \otimes \mathbb{I}_P] \cdot \hat{U}_{nl}$, onde o operador \hat{S} é o deslocamento condicional, responsável por deslocar o caminhante a cada passo e \mathbb{I}_P é a matriz identidade atuando no sub-espaço das posições H_p . Assim, utilizando as expressões dadas acima, podemos obter relações de recorrência para cada componente spinor do caminhante, de tal modo que:

$$\psi_{L,n}(t+1) = \frac{1}{3} \left[-e^{2\pi\chi|\psi_{L,n+1}(t)|^2} \psi_{L,n+1}(t) + 2e^{2\pi\chi|\psi_{S,n+1}(t)|^2} \psi_{S,n+1}(t) + 2e^{2\pi\chi|\psi_{R,n+1}(t)|^2} \psi_{R,n+1}(t) \right], \quad (5.3)$$

$$\psi_{S,n}(t+1) = \frac{1}{3} \left[2e^{2\pi\chi|\psi_{L,n}(t)|^2} \psi_{L,n}(t) - e^{2\pi\chi|\psi_{S,n}(t)|^2} \psi_{S,n}(t) + 2e^{2\pi\chi|\psi_{R,n}(t)|^2} \psi_{R,n}(t) \right], \quad (5.4)$$

$$\psi_{R,n}(t+1) = \frac{1}{3} \left[2e^{2\pi\chi|\psi_{L,n-1}(t)|^2} \psi_{L,n-1}(t) + 2e^{2\pi\chi|\psi_{S,n-1}(t)|^2} \psi_{S,n-1}(t) - e^{2\pi\chi|\psi_{R,n-1}(t)|^2} \psi_{R,n-1}(t) \right]. \quad (5.5)$$

Conforme já enfatizado durante essa dissertação, o comportamento do caminhante quântico de três estados pode ser mais facilmente compreendido se escrevermos o estado inicial como uma combinação linear dos autovetores do operador moeda \hat{C} . Para a moeda de Grover, esses autovetores se reduzem as expressões:

$$|\sigma^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|L\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|S\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|R\rangle, \quad (5.6)$$

$$|\sigma_1^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|L\rangle - \frac{2}{\sqrt{6}}|S\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|R\rangle, \quad (5.7)$$

$$|\sigma_2^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|L\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|R\rangle, \quad (5.8)$$

onde $\hat{C}|\sigma^+\rangle = |\sigma^+\rangle$ e $\hat{C}|\sigma_i^-\rangle = -|\sigma_i^-\rangle$, com $i \in \{1, 2\}$. Agora que já detalhamos o modelo que será analisado ao longo desse capítulo, iremos estudar a dinâmica do sistema.

5.2 Resultados

Na seguinte discussão, faremos nossa análise sobre os estados $|\sigma^+\rangle$ e $|\sigma_1^-\rangle$. Isso se deve pois, além de ambos os estados possuírem distribuições de probabilidades distintas no caso linear, eles mantêm uma distribuição simétrica quando estamos estudando efeitos não-lineares na caminhada de três estados. Além disso, vamos considerar que o número de sítios N presente na rede unidimensional é grande o suficiente para que possamos evitar qualquer efeito de borda no sistema.

Inicialmente, iremos analisar a evolução temporal da densidade de probabilidade $|\psi_n|^2$ do caminhante para diversos valores de χ e para as duas configurações iniciais, conforme ilustrado na figura 29. Quando apenas efeitos lineares são levados em consideração ($\chi = 0$), podemos ver que o comportamento típico do caminhante, detalhado no capítulo 3, é recuperado. Para o estado $|\sigma^+\rangle$, não haverá picos de probabilidade nas frentes de onda do caminhante e temos que uma parcela significativa do pacote ficará preso na posição original e em seus primeiros vizinhos. Já quando o estado é $|\sigma_1^-\rangle$, não há localização no sistema, de modo que a caminhada se assemelha ao caminhante Hadamard convencional.

Entretanto, quando efeitos não-lineares são levados em consideração, o comportamento do caminhante se altera drasticamente. Por exemplo, quando nós fixamos uma não-linearidade $\chi = 0.2$ e $|\psi(t=0)\rangle = |\sigma^+\rangle$, a parcela que ficaria armadilhada na posição central se reduz consideravelmente, enquanto que as amplitudes do caminhante na vizinhança da frente de onda são amplificadas. Quando a não-linearidade fraca atua no estado $|\sigma_1^-\rangle$, vemos a formação de dois sólitons se propagando na rede, conforme já visto na caminhada não-linear introduzida por Navarrete et al. (NAVARRETE-BENLLOCH; PÉREZ; ROLDÁN, 2007). Além disso, podemos ver que uma parcela do caminhante ficará armadilhada ao redor da posição central.

Quando aumentamos ainda mais o parâmetro de não-linearidade χ do sistema, um novo efeito aparece no estudo de caminhadas quânticas discretas, a irradiação da estrutura solitônica armadilhada na posição inicial. Conforme podemos ver nas figuras 29(c) e 29(g), o caminhante fica durante um certo tempo em um regime meta-estável, onde a

Figura 29 – Evolução temporal da densidade de probabilidade para diversos valores de χ para os estados (a)-(d) $|\sigma^+\rangle$ e (e)-(h) $|\sigma_1^-\rangle$. Aqui, torna-se claro que a adição de um operador não-linear na dinâmica do sistema muda drasticamente a distribuição de probabilidade do caminhante, levando ao fenômeno da radiação do pulso central.

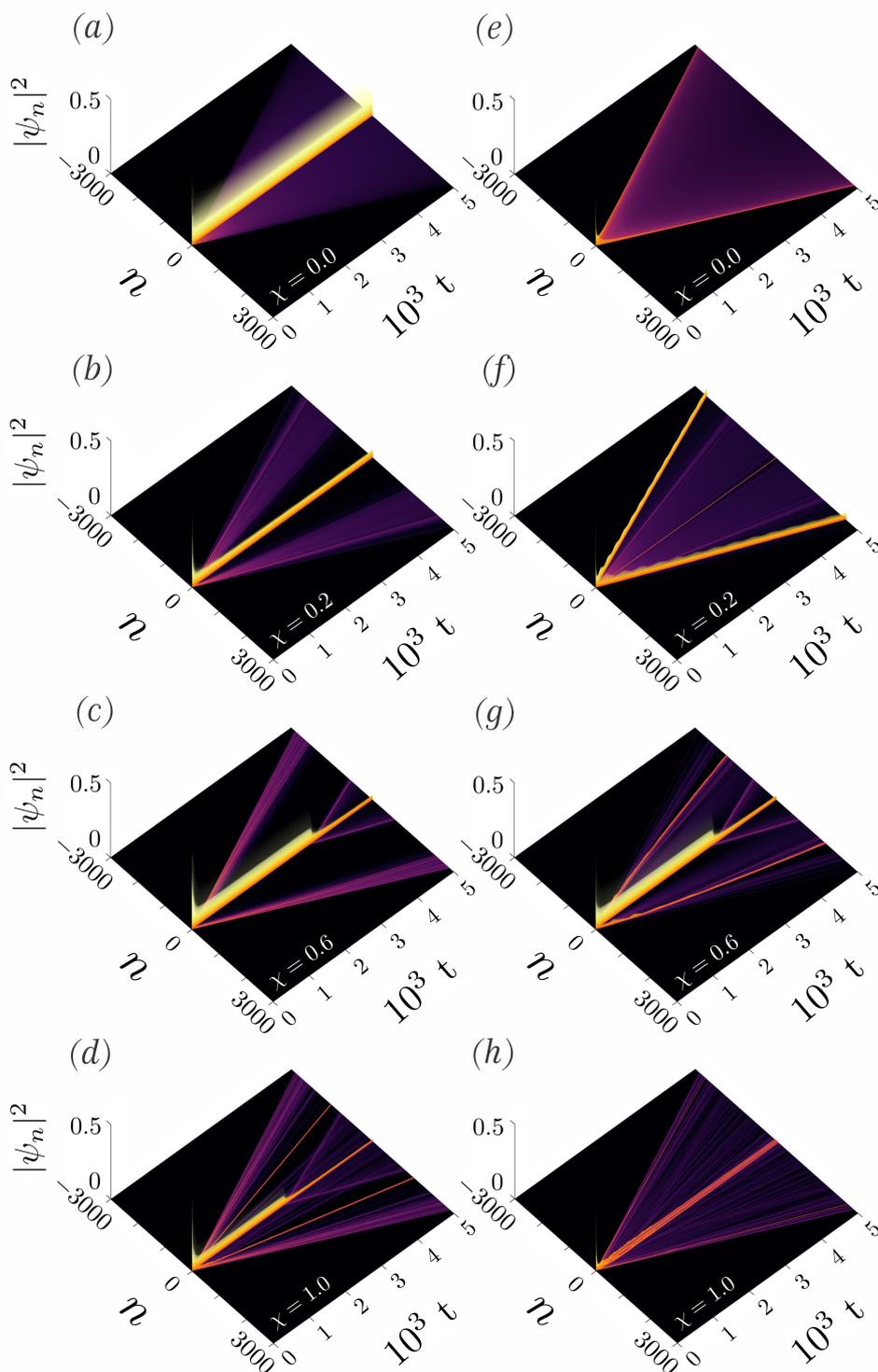
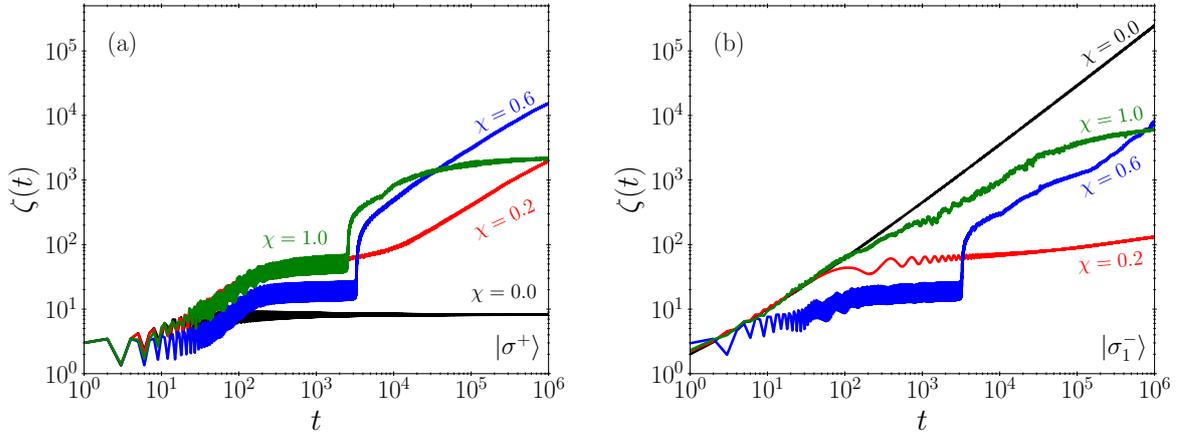


Figura 30 – Razão de participação ζ em função do número de passos para os estados (a) $|\sigma^+\rangle$ e (b) $|\sigma_1^-\rangle$ e para diversos valores do parâmetro de não-linearidade. Ambas as figuras apresentam a dinâmica de irradiação quando efeitos não-lineares são levados em consideração.



Fonte: Autor - 2021

probabilidade de encontrar ele na origem tenta saturar em um valor constante. Entretanto, após esse certo tempo transiente, o pulso armadilhado se quebra repentinamente, fazendo com que essa porção presa comece a irradiar ao longo da cadeia. Perceba que isso também ocorre em $\chi = 1$ apenas para o estado $|\sigma^+\rangle$, indicando que o regime onde isso ocorre depende da configuração inicial.

Para melhor caracterizar essa dinâmica de irradiação, ilustramos a evolução temporal da razão de participação ζ para ambos os estados na figura 30, onde utilizamos as mesmas configurações analisadas na figura anterior. Vale lembrar que essa função é dada por:

$$\zeta(t) = \frac{1}{\sum_n |\psi_n(t)|^4},$$

onde essa soma percorre todos os sítios da rede.

Conforme podemos ver, o caso linear do estado $|\sigma^+\rangle$ irá saturar em uma constante, conforme já falamos anteriormente. Entretanto, quando introduzimos uma não-linearidade baixa na dinâmica do sistema ($\chi = 0.2$), já podemos perceber que o comportamento de ζ muda drasticamente. Vemos que essa quantidade cresce a medida que o caminhante evolui temporalmente, o que indica que o pulso armadilhado visto na figura 29(b) também começará a irradiar após um certo tempo, indicando que esse fenômeno de irradiação já aparece quando introduzirmos fracas não-linearidades no sistema. Se aumentarmos ainda mais o parâmetro χ , vemos que a participação tentará saturar em um valor finito mas, após um certo tempo, o pulso armadilhado irá sofrer uma quebra repentina de seu formato e começará a irradiar por toda a rede, o que fará com que ζ cresça abruptamente. Essa abrupta irradiação também ocorrerá em $\chi = 1.0$ após um certo tempo transiente mas,

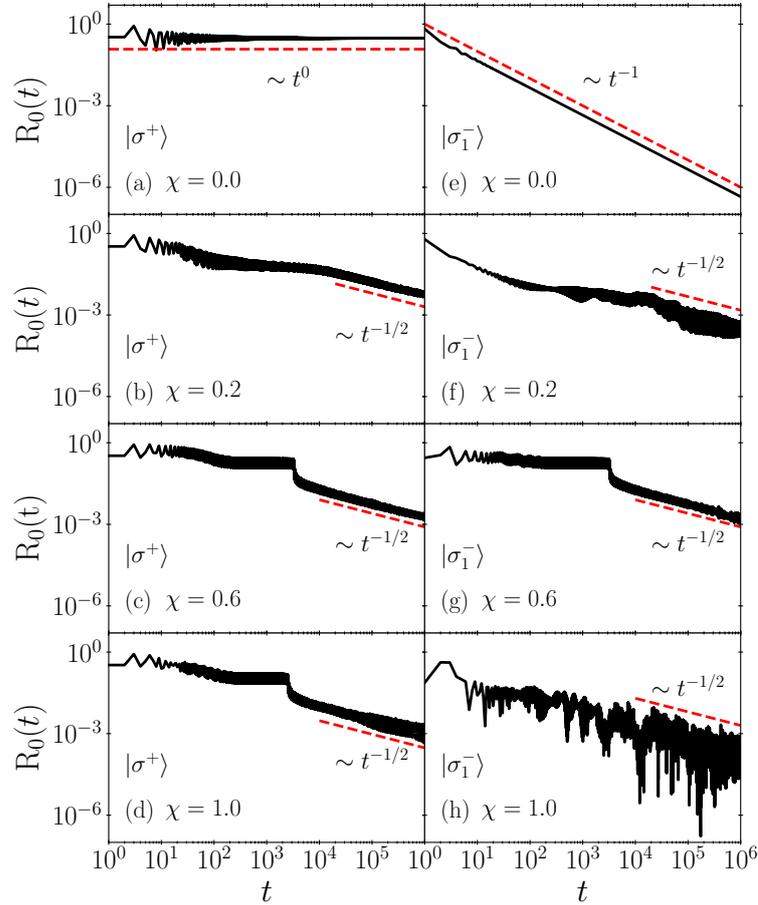
aparentemente, irá saturar em um valor. Provavelmente, isso se deve ao comportamento caótico que o sistema adquire quando não-linearidades altas são levadas em consideração, conforme já visto no sistema de dois estados (NAVARRETE-BENLLOCH; PÉREZ; ROLDÁN, 2007; BUARQUE; DIAS, 2020; BUARQUE; DIAS, 2021).

Já quando consideramos o autovetor $|\sigma_1^-\rangle$ no caso linear, podemos ver que ζ evolui temporalmente com a devida correção logarítmica apresentada no capítulo anterior. Quando contribuições não-lineares são adicionadas na dinâmica do sistema, um padrão similar ao caso de $|\sigma^+\rangle$ ocorre para $\chi = 0.2$, apenas com uma inclinação menor. Isso se deve pois, como há a existência de estruturas do tipo soliton, uma grande parcela do pacote de onda ficará armadilhada nessas regiões e assim ζ não crescerá tanto ao longo do tempo. No caso em que $\chi = 0.6$, podemos ver também há aquele regime onde essa quantidade irá saturar em uma constante e, após um certo tempo transiente, terá o crescimento abrupto de ζ devido ao processo de irradiação. Entretanto, esse comportamento de quebra repentina do pacote preso ao redor de $n = 0$ não ocorre em $\chi = 1.0$, mostrando que o intervalo em χ onde esse efeito ocorre depende diretamente do estado inicial do caminhante.

Para melhor caracterizar esse fenômeno de irradiação, vamos analisar a probabilidade de retorno R_0 do caminhante em função do número de passos. Essa evolução temporal do retorno está ilustrado para os estados $|\sigma^+\rangle$ e $|\sigma_1^-\rangle$ nas figuras 31(a)-(d) e 31(e)-(h), respectivamente. Aqui, utilizamos os mesmos parâmetros de não-linearidade analisados nas últimas duas figuras.

Os comportamentos quando $\chi = 0$ já são conhecidos, saturando em um valor finito para o estado $|\sigma^+\rangle$ e decaindo proporcionalmente com o número de passos para o estado $|\sigma_1^-\rangle$. Entretanto, ao introduzirmos efeitos não-lineares na dinâmica do sistema, podemos ver como o processo de irradiação altera completamente a evolução da probabilidade de retorno. Por exemplo, quando $\chi = 0.2$, R_0 irá tentar saturar em um valor finito mas, após um certo intervalo de tempo, a probabilidade de encontrar o caminhante em $n = 0$ irá decair aproximadamente com a raiz quadrada do número de passos t , ou seja, $R_0 \sim t^{-1/2}$. Quando fixamos $\chi = 0.6$, a quebra abrupta do pulso armadilhado irá acontecer. Nesse valor de não-linearidade, fica claro que o caminhante permanece em um regime meta-estável durante um certo tempo, fazendo com que o retorno tente saturar em um valor finito. Entretanto, após um certo intervalo de tempo, esse pulso escapa dessa região ao redor de $n = 0$ e a probabilidade de encontrar o caminhante nessa posição começa a decair a medida que o sistema evolui temporalmente, com a mesma lei de potência encontrada no caso onde $\chi = 0.2$. Quando aumentamos ainda mais o parâmetro de não-linearidade ($\chi = 1.0$), essa quebra repentina também aparece para o estado $|\sigma^+\rangle$, mas não para $|\sigma_1^-\rangle$. Entretanto, mesmo nesse caso, a probabilidade de retorno também cairá com a raiz quadrada do número de passo, em média. Essa lei de potência parece ser válida para qualquer valor de χ e, portanto, todos os picos de probabilidade presos ao redor da origem irão irradiar com

Figura 31 – Probabilidade de retorno em função do número de passos para os estados (a)-(d) $|\sigma^+\rangle$ e (e)-(h) $|\sigma_1^-\rangle$. Aqui, consideramos os mesmos valores de χ analisados anteriormente. Conforme podemos ver, o fenômeno de radiação do pulso central se torna claro, revelando que essa dinâmica acontece com uma lei de potência aproximada.



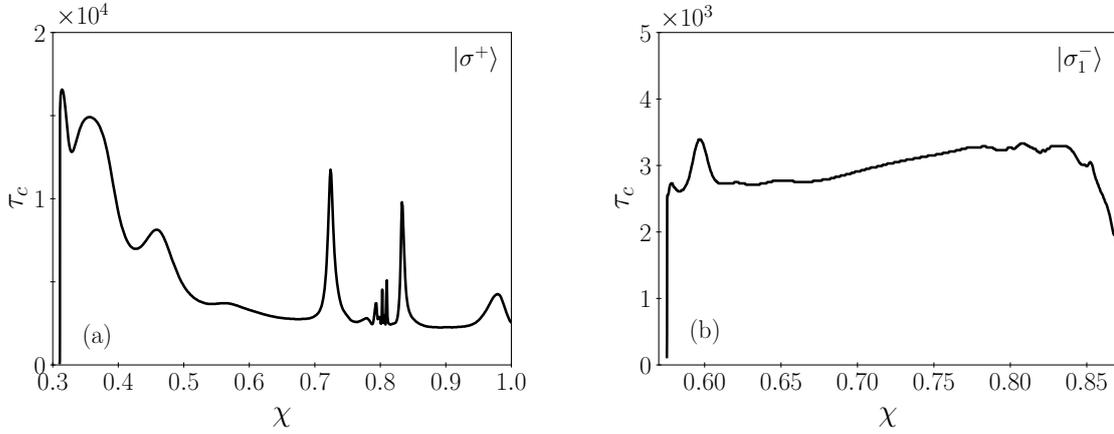
Fonte: Autor - 2021

essa lei de potência.

Perceba que enfatizamos que, após um certo período de tempo, ocorrerá a repentina quebra do pulso armadilhado e o processo de irradiação sobre todos os sítios da rede irá emergir. Ao olharmos a evolução temporal da razão de participação, ilustrada na figura 30, podemos observar que o tempo onde o caminhante sai do regime meta-estável e começa a irradiar pode ser calculado, de maneira aproximada, se olharmos em qual valor de t a participação cresce repentinamente. Assim, para obtermos o tempo de escape τ_c , nós evoluímos temporalmente ζ , pegamos o valor médio a cada vinte passos e calculamos o valor máximo da diferença entre dois pontos realizados por essa média. Tal método nos permite obter esse tempo de escape de uma maneira aproximado.

Assim, plotamos o gráfico do tempo de escape em função do parâmetro de não-linearidade χ para os dois estados estudados. Esse gráfico está ilustrado na figura 32

Figura 32 – Tempo de escape τ_c em função do parâmetro de não-linearidade χ para os estados (a) $|\sigma^+\rangle$ e (b) $|\sigma_1^-\rangle$. Perceba que o comportamento é bem distinto para os dois casos. Em especial, para o vetor $|\sigma^+\rangle$, existem alguns valores de χ onde τ_c cresce abruptamente.



Fonte: Autor - 2021

e mostra que o comportamento de τ_c é completamente diferente para os dois casos. Quando estudamos o caso do estado $|\sigma^+\rangle$, o tempo de escape possuirá um comportamento bem interessante, onde para alguns valores do parâmetro de não-linearidade τ_c cresce abruptamente, se tornando muito maior quando comparado a não-linearidades próximas. Para exemplificar isso, quando o parâmetro não-linear é igual a 0.724, o tempo de escape é aproximadamente $\tau_c \approx 1.1 \times 10^4$, enquanto que esse tempo de escape cai pela metade quando consideramos o intervalo $\chi = 0.724 \pm 0.07$. Para esse estado, essa mudança abrupta entre regimes se inicia em $\chi \approx 0.310$ e atinge seu valor máximo quando o parâmetro de não-linearidade é $\chi = 0.314$. Após esse valor, a transição entre regime meta-estável para irradiação ocorrerá para qualquer valor de χ . Isso não ocorre quando estudamos o estado $|\sigma^+\rangle$, conforme evidenciado na figura 32(b). Nesse caso, essa mudança abrupta de regimes ocorre quando $\chi \in [0.575, 0.870]$ e possui um comportamento menos sensível a mudança de não-linearidade que o caso $|\sigma^+\rangle$, possuindo um valor máximo em $\chi = 0.597$.

Estudar esses comportamentos não-lineares em caminhadas quânticas podem trazer novas ideias para a descrição de fenômenos físicos. Portanto, apesar da implementação física das caminhadas quânticas de três estados ainda não terem sido realizadas, esse estudo trás uma noção do comportamento que encontraremos quando técnicas experimentais para a implementação forem alcançadas. Além disso, conforme vimos anteriormente, não-linearidades podem fazer com que seja elaborado estratégias para a melhoria de algoritmos de busca, conforme mostrado por Meyer e Wong (MEYER; WONG, 2013; MEYER; WONG, 2014). Como as caminhadas quânticas indolentes, um modelo análogo a caminhada de três estados, também pode ser utilizadas para a melhoria desses algoritmos, a possível combinação dos dois efeitos pode amplificar essa melhoria.

6 Conclusão

Ao longo dessa dissertação, estudamos as propriedades das caminhadas quânticas discretas em redes unidimensionais. Esses sistemas servem como um análogo quântico ao problema do passeio aleatório clássico e estão sendo amplamente estudadas na área de computação quântica. No capítulo 2, entendemos a estrutura básica da caminhada com dois graus de liberdade interno, ou seja, considerando o caminhante como um qubit. Vimos que devido a coerência quântica, o alargamento do pacote é quadraticamente mais rápido que o caso clássico e que essa propriedade é bastante útil no desenvolvimento de algoritmos quânticos. Além disso, vimos como implementar essa caminhada em diversos modelos físicos e como a transição entre o comportamento quântico para o clássico é realizada.

Já no capítulo 3, respondemos a pergunta do que aconteceria com o caminhante se houvesse uma probabilidade não-nula da partícula ficar na mesma posição a cada instante de tempo, introduzindo assim o principal modelo estudado ao longo desse trabalho. Vimos que a adição dessa quiralidade extra induz uma forte localização do caminhante ao redor da posição original, algo que não acontecesse em seu análogo clássico. Fizemos um estudo detalhado dessa caminhada, obtendo que as propriedades desse sistema podem ser mais facilmente entendidas se escrevermos a configuração inicial do caminhante na base dos autovetores do operador moeda quântica.

No quarto capítulo, estudamos o comportamento da caminhada de três estados ao redor do ponto de delocalização do sistema. Fizemos uma análise de escala temporal ao redor desse ponto e mostramos que quantidades bastante utilizadas no estudo das caminhadas quânticas, como a probabilidade de retorno ou a razão de participação, satisfazem leis de escalas universais ao redor desse ponto, podendo serem escritas em função de um único parâmetro de escala. Essa análise de escala não é comumente utilizada na literatura de caminhadas quântica e, portanto, esperamos que os resultados obtidos nesse trabalho tragam possíveis novas ideias para o incremento da literatura, inclusive de modelos bastante estudados. Além disso, obtemos uma expressão analítica para a razão de participação quando estamos estudando o estado que se assemelha a caminhada de dois estados. Esse resultado mostra que a evolução sublinear reportada na literatura é reflexo de uma correção logarítmica na verdadeira lei de potência dessa quantidade. Os resultados obtidos nessa seção foram publicados na revista *Physical Review E*, com o PDF do artigo original sendo encontrado no anexo dessa monografia.

Por fim, respondemos no capítulo 5 como a adição de um operador que simula meios não-lineares afetaria o comportamento dessa caminhada. Vimos que a dinâmica da partícula é tremendamente afetada por esse novo operador, levando a um comportamento até antes

inédito na literatura das caminhadas quânticas, a irradiação do pulso solitônico preso na posição original. Essa irradiação segue uma determinada lei de potência, fazendo com que esse pulso armadilhado caia inversamente proporcional a raiz quadrada do número de passos t . Isso ocorre independente da configuração inicial e da não-linearidade do sistema. Determinamos também o tempo de escape τ_c , onde o caminhante sai de um regime meta-estável para começar o processo de irradiação. Esse tempo depende diretamente da configuração inicial do caminhante, possuindo características muito distintas quando modificamos essa configuração.

Como perspectivas futuras, pretendemos estudar melhor a relação entre o tempo de escape τ_c e a configuração inicial do caminhante, de modo a entender como e porquê essa quantidade possui comportamentos que mudam significativamente com a escolha do estado inicial. Além disso, pretendemos estender o modelo não-linear para o caso de uma moeda generalizada pelo parâmetro ρ , de modo a investigarmos se haverá portas quânticas onde o caminhante fica totalmente armadilhado na posição original, além de outros possíveis efeitos que podem emergir nessa dinâmica não-linear.

Assim, esperamos que os resultados apresentados ao longo dessa dissertação contribuam com a literatura de caminhadas quânticas, trazendo ideias para a realização de novos estudos em um futuro próximo.

Referências

- AHARONOV, Y.; DAVIDOVICH, L.; ZAGURY, N. Quantum random walks. *Physical Review A*, APS, v. 48, n. 2, p. 1687, 1993. Citado na página 16.
- AMBAINIS, A. et al. One-dimensional quantum walks. In: *Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing*. [S.l.: s.n.], 2001. p. 37–49. Citado 3 vezes nas páginas 21, 24 e 26.
- AMBAINIS, A.; KEMPE, J.; RIVOSH, A. Coins make quantum walks faster. *arXiv preprint quant-ph/0402107*, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 23.
- ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical review*, APS, v. 109, n. 5, p. 1492, 1958. Citado na página 29.
- ARUTE, F. et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 574, n. 7779, p. 505–510, 2019. Citado na página 16.
- ASBÓTH, J. K. Symmetries, topological phases, and bound states in the one-dimensional quantum walk. *Physical Review B*, APS, v. 86, n. 19, p. 195414, 2012. Citado na página 17.
- BOUWMEESTER, D. et al. Optical galton board. *Physical Review A*, APS, v. 61, n. 1, p. 013410, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 38.
- BRAND, M. A random walks perspective on maximizing satisfaction and profit. In: *SIAM. Proceedings of the 2005 siam International Conference on Data mining*. [S.l.], 2005. p. 12–19. Citado na página 13.
- BUARQUE, A.; DIAS, W. Aperiodic space-inhomogeneous quantum walks: Localization properties, energy spectra, and enhancement of entanglement. *Physical Review E*, APS, v. 100, n. 3, p. 032106, 2019. Citado na página 30.
- BUARQUE, A.; DIAS, W. Self-trapped quantum walks. *Physical Review A*, APS, v. 101, n. 2, p. 023802, 2020. Citado 5 vezes nas páginas 37, 42, 72, 73 e 77.
- BUARQUE, A.; DIAS, W. Probing coherence and noise tolerance in discrete-time quantum walks: unveiling self-focusing and breathing dynamics. *Physical Review A*, APS, v. 103, n. 4, p. 042213, 2021. Citado 4 vezes nas páginas 37, 42, 73 e 77.
- BUARQUE, A.; LYRA, M.; DIAS, W. Bloch-like superoscillations and unidirectional motion of phase-driven quantum walkers. *Physical Review A*, APS, v. 103, n. 1, p. 012222, 2021. Citado na página 17.
- CALOZ, C. et al. Electromagnetic nonreciprocity. *Physical Review Applied*, APS, v. 10, n. 4, p. 047001, 2018. Citado na página 18.
- CHANDRASEKHAR, S. Stochastic problems in physics and astronomy. *Reviews of modern physics*, APS, v. 15, n. 1, p. 1, 1943. Citado na página 13.

CHANDRASHEKAR, C. Disordered-quantum-walk-induced localization of a bose-einstein condensate. *Physical Review A*, APS, v. 83, n. 2, p. 022320, 2011. Citado na página 30.

CHANDRASHEKAR, C.; LAFLAMME, R. Quantum phase transition using quantum walks in an optical lattice. *Physical Review A*, APS, v. 78, n. 2, p. 022314, 2008. Citado na página 17.

CHILDS, A. M. Universal computation by quantum walk. *Physical review letters*, APS, v. 102, n. 18, p. 180501, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 36.

CHILDS, A. M.; GOLDSTONE, J. Spatial search and the dirac equation. *Physical Review A*, APS, v. 70, n. 4, p. 042312, 2004. Citado na página 36.

DEUTSCH, D. Quantum theory, the church–turing principle and the universal quantum computer. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society London, v. 400, n. 1818, p. 97–117, 1985. Citado na página 15.

FALKNER, S.; BOETTCHER, S. Weak limit of the three-state quantum walk on the line. *Physical Review A*, APS, v. 90, n. 1, p. 012307, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 53.

FARHI, E.; GUTMANN, S. Quantum computation and decision trees. *Physical Review A*, APS, v. 58, n. 2, p. 915, 1998. Citado na página 16.

FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. In: *Feynman and computation*. [S.l.]: CRC Press, 2018. p. 133–153. Citado na página 15.

GIRI, P. R.; KOREPIN, V. Lackadaisical quantum walk for spatial search. *Modern Physics Letters A*, World Scientific, v. 35, n. 08, p. 2050043, 2020. Citado na página 48.

GROVER, L. K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. *Physical review letters*, APS, v. 79, n. 2, p. 325, 1997. Citado na página 15.

HØYER, P.; YU, Z. Analysis of lackadaisical quantum walks. *arXiv preprint arXiv:2002.11234*, 2020. Citado na página 48.

INUI, N.; KONISHI, Y.; KONNO, N. Localization of two-dimensional quantum walks. *Physical Review A*, APS, v. 69, n. 5, p. 052323, 2004. Citado 3 vezes nas páginas 23, 30 e 47.

INUI, N.; KONNO, N. Localization of multi-state quantum walk in one dimension. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 353, p. 133–144, 2005. Citado 4 vezes nas páginas 23, 30, 47 e 48.

INUI, N.; KONNO, N.; SEGAWA, E. One-dimensional three-state quantum walk. *Physical Review E*, APS, v. 72, n. 5, p. 056112, 2005. Citado 5 vezes nas páginas 23, 43, 45, 47 e 48.

KEATING, J. P. et al. Localization and its consequences for quantum walk algorithms and quantum communication. *Physical Review A*, APS, v. 76, n. 1, p. 012315, 2007. Citado na página 30.

KEMPE, J. Discrete quantum walks hit exponentially faster. *Probability theory and related fields*, Springer, v. 133, n. 2, p. 215–235, 2005. Citado na página 26.

- KEMPF, A.; PORTUGAL, R. Group velocity of discrete-time quantum walks. *Physical Review A*, APS, v. 79, n. 5, p. 052317, 2009. Citado na página 26.
- KENDON, V. Decoherence in quantum walks—a review. *Mathematical Structures in Computer Science*, Cambridge University Press, v. 17, n. 6, p. 1169–1220, 2007. Citado na página 35.
- KENDON, V.; TREGENNA, B. Decoherence can be useful in quantum walks. *Physical Review A*, APS, v. 67, n. 4, p. 042315, 2003. Citado na página 35.
- KITAGAWA, T. et al. Exploring topological phases with quantum walks. *Physical Review A*, APS, v. 82, n. 3, p. 033429, 2010. Citado na página 17.
- KNIGHT, P. L.; ROLDÁN, E.; SIPE, J. E. Optical cavity implementations of the quantum walk. *Optics Communications*, Elsevier, v. 227, n. 1-3, p. 147–157, 2003. Citado na página 38.
- KNIGHT, P. L.; ROLDÁN, E.; SIPE, J. E. Quantum walk on the line as an interference phenomenon. *Physical Review A*, APS, v. 68, n. 2, p. 020301, 2003. Citado na página 38.
- KOLLÁR, B. et al. Recurrences in three-state quantum walks on a plane. *Physical Review A*, APS, v. 82, n. 1, p. 012303, 2010. Citado na página 48.
- KRAMER, B.; MACKINNON, A. Localization: theory and experiment. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 56, n. 12, p. 1469, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 32.
- LEE, C.-W.; KURZYŃSKI, P.; NHA, H. Quantum walk as a simulator of nonlinear dynamics: Nonlinear dirac equation and solitons. *Physical Review A*, APS, v. 92, n. 5, p. 052336, 2015. Citado na página 35.
- LI, N. et al. Colloquium: Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 84, n. 3, p. 1045, 2012. Citado na página 18.
- LIANG, B. et al. An acoustic rectifier. *Nature materials*, Nature Publishing Group, v. 9, n. 12, p. 989–992, 2010. Citado na página 18.
- LOVETT, N. B. et al. Universal quantum computation using the discrete-time quantum walk. *Physical Review A*, APS, v. 81, n. 4, p. 042330, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 36.
- MACHIDA, T. Limit theorems of a 3-state quantum walk and its application for discrete uniform measures. *arXiv preprint arXiv:1404.1522*, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 53.
- MACHIDA, T.; CHANDRASHEKAR, C. Localization and limit laws of a three-state alternate quantum walk on a two-dimensional lattice. *Physical Review A*, APS, v. 92, n. 6, p. 062307, 2015. Citado na página 30.
- MALDOVAN, M. Sound and heat revolutions in phononics. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 503, n. 7475, p. 209–217, 2013. Citado na página 18.
- MENDES, C. et al. Localization-delocalization transition in discrete-time quantum walks with long-range correlated disorder. *Physical Review E*, APS, v. 99, n. 2, p. 022117, 2019. Citado na página 30.

- MENDONÇA, J. et al. Emergent nonlinear phenomena in discrete-time quantum walks. *Physical Review A*, APS, v. 101, n. 6, p. 062335, 2020. Citado na página 37.
- MEYER, D. A.; WONG, T. G. Nonlinear quantum search using the gross-pitaevskii equation. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 15, n. 6, p. 063014, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 79.
- MEYER, D. A.; WONG, T. G. Quantum search with general nonlinearities. *Physical Review A*, APS, v. 89, n. 1, p. 012312, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 79.
- MODUGNO, G. Anderson localization in bose-einstein condensates. *Reports on progress in physics*, IOP Publishing, v. 73, n. 10, p. 102401, 2010. Citado na página 30.
- MOLFETTA, G. D.; DEBBASCH, F.; BRACHET, M. Nonlinear optical galton board: Thermalization and continuous limit. *Physical Review E*, APS, v. 92, n. 4, p. 042923, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 73.
- NASSAR, H. et al. Nonreciprocity in acoustic and elastic materials. *Nature Reviews Materials*, Nature Publishing Group, v. 5, n. 9, p. 667–685, 2020. Citado na página 18.
- NAVARRETE-BENLLOCH, C.; PÉREZ, A.; ROLDÁN, E. Nonlinear optical galton board. *Physical Review A*, APS, v. 75, n. 6, p. 062333, 2007. Citado 6 vezes nas páginas 37, 40, 72, 73, 74 e 77.
- NAYAK, A.; VISHWANATH, A. Quantum walk on the line. *arXiv preprint quant-ph/0010117*, 2000. Citado na página 28.
- NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. *Quantum computation and quantum information*. [S.l.]: American Association of Physics Teachers, 2002. Citado na página 27.
- OMANAKUTTAN, S.; LAKSHMINARAYAN, A. Quantum walk on a toral phase space. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 51, n. 38, p. 385306, 2018. Citado na página 67.
- PEARSON, K. The problem of the random walk. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 72, n. 1867, p. 342–342, 1905. Citado na página 13.
- PIRES, M. A.; QUEIRÓS, S. D. Quantum walks with sequential aperiodic jumps. *Physical Review E*, APS, v. 102, n. 1, p. 012104, 2020. Citado na página 30.
- RAKOVSKY, T.; ASBOTH, J. K. Localization, delocalization, and topological phase transitions in the one-dimensional split-step quantum walk. *Physical Review A*, APS, v. 92, n. 5, p. 052311, 2015. Citado na página 17.
- RAYLEIGH, L. The problem of the random walk. *Nature*, v. 72, n. 1866, p. 318, 1905. Citado na página 13.
- SAHA, A. et al. One-dimensional lazy quantum walk in ternary system. *IEEE Transactions on Quantum Engineering*, IEEE, v. 2, p. 1–12, 2021. Citado na página 43.
- SEGEV, M.; SILBERBERG, Y.; CHRISTODOULIDES, D. N. Anderson localization of light. *Nature Photonics*, Nature Publishing Group, v. 7, n. 3, p. 197–204, 2013. Citado na página 30.

- SHENVI, N.; KEMPE, J.; WHALEY, K. B. Quantum random-walk search algorithm. *Physical Review A*, APS, v. 67, n. 5, p. 052307, 2003. Citado na página 35.
- SHIKANO, Y.; WADA, T.; HORIKAWA, J. Discrete-time quantum walk with feed-forward quantum coin. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 4, n. 1, p. 1–7, 2014. Citado na página 37.
- SHOR, P. W. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In: IEEE. *Proceedings 35th annual symposium on foundations of computer science*. [S.l.], 1994. p. 124–134. Citado na página 15.
- SHOR, P. W. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. *SIAM review*, SIAM, v. 41, n. 2, p. 303–332, 1999. Citado na página 15.
- ŠTEFAŇÁK, M. et al. Directional correlations in quantum walks with two particles. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 13, n. 3, p. 033029, 2011. Citado na página 54.
- ŠTEFAŇÁK, M.; BEZDĚKOVÁ, I.; JEX, I. Continuous deformations of the grover walk preserving localization. *The European Physical Journal D*, Springer, v. 66, n. 5, p. 1–7, 2012. Citado na página 50.
- ŠTEFAŇÁK, M.; BEZDĚKOVÁ, I.; JEX, I. Limit distributions of three-state quantum walks: the role of coin eigenstates. *Physical Review A*, APS, v. 90, n. 1, p. 012342, 2014. Citado na página 54.
- STRAUCH, F. W. Relativistic quantum walks. *Physical Review A*, APS, v. 73, n. 5, p. 054302, 2006. Citado na página 35.
- TREGENNA, B. et al. Controlling discrete quantum walks: coins and initial states. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 5, n. 1, p. 83, 2003. Citado na página 28.
- TUDE, L. T.; OLIVEIRA, M. C. de. Temperature of the three-state quantum walk. *arXiv preprint arXiv:2012.07904*, 2020. Citado na página 43.
- TUDE, L. T.; OLIVEIRA, M. C. de. Decoherence in the three-state quantum walk. *arXiv preprint arXiv:2107.09124*, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 43.
- VENEGAS-ANDRACA, S. E. Quantum walks: a comprehensive review. *Quantum Information Processing*, Springer, v. 11, n. 5, p. 1015–1106, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 23, 26 e 27.
- WANG, J.; MANOUCHEHRI, K. *Physical implementation of quantum walks*. [S.l.]: Springer, 2013. Citado 4 vezes nas páginas 17, 36, 39 e 40.
- WANG, K. et al. Simulating dynamic quantum phase transitions in photonic quantum walks. *Physical review letters*, APS, v. 122, n. 2, p. 020501, 2019. Citado na página 17.
- WANG, K. et al. One-dimensional lackadaisical quantum walks. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 50, n. 50, p. 505303, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 53.
- WATABE, K. et al. Limit distributions of two-dimensional quantum walks. *Physical Review A*, APS, v. 77, n. 6, p. 062331, 2008. Citado na página 50.

- WATROUS, J. Quantum simulations of classical random walks and undirected graph connectivity. *Journal of computer and system sciences*, Elsevier, v. 62, n. 2, p. 376–391, 2001. Citado na página 16.
- WEGNER, F. Inverse participation ratio in $2 + \varepsilon$ dimensions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, Springer, v. 36, n. 3, p. 209–214, 1980. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 32.
- WONG, T. G. Grover search with lackadaisical quantum walks. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 48, n. 43, p. 435304, 2015. Citado na página 48.
- WONG, T. G. Coined quantum walks on weighted graphs. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 50, n. 47, p. 475301, 2017. Citado na página 53.
- WONG, T. G. Faster search by lackadaisical quantum walk. *Quantum Information Processing*, Springer, v. 17, n. 3, p. 1–9, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 48.
- XIA, F. et al. Random walks: A review of algorithms and applications. *IEEE Transactions on Emerging Topics in Computational Intelligence*, IEEE, v. 4, n. 2, p. 95–107, 2019. Citado na página 13.
- ZHANG, P. et al. Demonstration of one-dimensional quantum random walks using orbital angular momentum of photons. *Physical Review A*, APS, v. 75, n. 5, p. 052310, 2007. Citado na página 36.
- ZOU, X.; DONG, Y.; GUO, G. Optical implementation of one-dimensional quantum random walks using orbital angular momentum of a single photon. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 8, n. 5, p. 81, 2006. Citado na página 36.

ANEXO A – Artigo publicado no periódico
Physical Review E.

Universal dynamical scaling laws in three-state quantum walksP. R. N. Falcão *, A. R. C. Buarque , W. S. Dias, G. M. A. Almeida, and M. L. Lyra *Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-900 Maceió, Alagoas, Brazil*

(Received 19 August 2021; revised 26 September 2021; accepted 15 October 2021; published 9 November 2021)

We perform a finite-time scaling analysis over the detrapping point of a three-state quantum walk on the line. The coin operator is parametrized by ρ that controls the wave packet spreading velocity. The input state prepared at the origin is set as a symmetric linear combination of two eigenstates of the coin operator with a characteristic mixing angle θ , one of them being the component that results in full spreading occurring at $\theta_c(\rho)$ for which no fraction of the wave packet remains trapped near the initial position. We show that relevant quantities, such as the survival probability and the participation ratio assume single parameter scaling forms at the vicinity of the detrapping angle θ_c . In particular, we show that the participation ratio grows linearly in time with a logarithmic correction, thus, shedding light on previous reports of sublinear behavior.

DOI: [10.1103/PhysRevE.104.054106](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.104.054106)**I. INTRODUCTION**

For many decades, classical random walks have been essential for the development of algorithms as well for describing a wide range of physical phenomena. The story is no different for their quantum counterpart, namely, quantum walks since put forward by Aharonov *et al.* in [1]. They have been crucial to the progress of quantum computing, including the design of quantum algorithms [2–6] for search problems and state transfer [7–9] to name a few. One of the many advantages is the speedup gained from the fact that the quantum walker spreads out ballistically due to interference between its wave function amplitudes [10]. Moreover, it was shown both continuous and discrete versions make for universal quantum computation [11,12].

In the discrete-time quantum walk, particularly, the walker evolves through a predefined sequence of gates. The first gate is usually the coin operator that superposes its internal degrees of freedom, followed by the translation operator that moves it (say, left or right) depending on its internal state. This goes on and on until the protocol reaches its goal [13,14]. The key point here is that there are endless forms to set those rules and, thus, different routes to travel through the Hilbert space, that drives progress in assessing hard computational problems [15]. From that point of view, discrete-time quantum walks are also a powerful tool for quantum simulation of complex phenomena, such as quantum phase transitions [16–18], nonlinear dynamics [19–22], topological phases of matter [23–25], localization [26–29], and many others.

A remarkable feature is that in most of the cases pointed out above, the quantum walk setups giving rise to that kind of phenomena are simple two-state models on a line. We may get even more of it by adding, for instance, extra internal degrees of freedom. In this context, the three-state Grover walk

[30] has attracted some attention due to its many ubiquitous properties, one of them being an intrinsic localization taking place at the input site, something that just does not occur to the classical random walker. In this Grover walk, the walker can move to the left, right, and stay at the same position. The additional internal degree of freedom is responsible for the generation of a constant eigenvalue in Fourier space which leads to a nonvanishing probability at the initial input position. Thus, the probability to find the walker at this position will saturate to a constant value in the long time regime [30–32]. Two generalizations of the Grover walk was obtained in Ref. [33] by working out families of three-state coin operators that maintain localization. The same authors investigated the quantum walk dynamics in detail in Ref. [34], discussing the role played by each eigenvector on the dynamics via an analytical approach. Moreover, it was shown in Ref. [35] that a class of lackadaisical quantum walks (where each site features an integer number of self-loops) is equivalent to one of those continuous deformations of the three-state Grover coin proposed in Ref. [33]. Due to its faster ballistic dispersion, this kind of quantum walk can boost search algorithms in general graphs as demonstrated in Refs. [5,6]. More recently, an implementation of three-state quantum walks in a quantum circuit model was proposed in Ref. [36].

In this paper, we seek to unveil some similarities between a general form of the three-state Grover walk with other classes of discrete-time quantum walks by looking for dynamical scaling laws at the vicinity of the threshold where localization is suppressed. To do so, we define a set of effective two-component initial states whose relative phase is defined by a mixing angle θ . At the threshold $\theta = \theta_c$ the dynamics resembles that of the standard two-state Hadamard quantum walk for it evolves ballistically with no localized component. We show that the survival probability and the participation ratio satisfies universal dynamical scaling laws in the vicinity of θ_c for any value of the coin deformation parameter. We also obtain an analytical expression for the participation ratio featuring a logarithm correction. This is reported here and

*pedro.falcao@fis.ufal.br

actually explains the emergence of the effective sublinear time evolution seen in Ref. [37].

II. MODEL

We consider a quantum walker propagating through an infinite one-dimensional lattice. The Hilbert space of the system is made up of two parts, namely, $H = H_p \otimes H_c$, where H_p accounts for the position space $\{|x\rangle\}$ with $x \in \mathbb{Z}$, and H_c is a three-dimensional coin space, spanned by $\{|L\rangle = (1, 0, 0)^T, |S\rangle = (0, 1, 0)^T, |R\rangle = (0, 0, 1)^T\}$. The walker evolves in discrete time steps via $|\psi(t+1)\rangle = \hat{U}|\psi(t)\rangle$, where $\hat{U} = \hat{S}[\hat{C} \otimes \mathbb{I}]$ is a unitary operator with \mathbb{I} being the identity operator acting on H_p . At each step, following the coin operator \hat{C} responsible for mixing the internal degrees of freedom, the operator,

$$\hat{S} = \sum_{x=-\infty}^{\infty} [|x-1\rangle\langle x| \otimes |L\rangle\langle L| + |x\rangle\langle x| \otimes |S\rangle\langle S| + |x+1\rangle\langle x| \otimes |R\rangle\langle R|] \quad (1)$$

shifts each position state to the left, right, or none, according to its related internal state. The probability to find the walker at position x at a given step t is given by $P_x(t) = \sum_c |(\langle x| \otimes \langle c|)|\psi(t)\rangle|^2$ with $c \in \{L, S, R\}$.

The three-state coin operator we consider here is a one-parameter class of the Grover diffusion coin that preserves localization (see Ref. [33] for details), namely,

$$\hat{C}(\rho) = \begin{pmatrix} -\rho^2 & \rho\sqrt{2-2\rho^2} & 1-\rho^2 \\ \rho\sqrt{2-2\rho^2} & 2\rho^2-1 & \rho\sqrt{2-2\rho^2} \\ 1-\rho^2 & \rho\sqrt{2-2\rho^2} & -\rho^2 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

where the coin parameter $\rho \in (0, 1)$ determines the speed of ballistic dispersion. That means one will find the peaks at $\pm\rho t$ after t steps. Note that $\rho = 0$ yields trivial dynamics as \hat{C} is reduced to the permutation matrix, meaning that the walker will get stuck between the origin and its nearest neighbors. On the other hand, if $\rho = 1$ the coin operator gets the diagonal form, and no shuffling will occur during evolution. The standard unweighted Grover coin [30] is recovered when $\rho = 1/\sqrt{3}$.

At this point, we will work out the eigenvectors of the coin operator defined above as expressing the walker input state in such a basis will simplify the analysis considerably. Straightforward algebra leads to

$$|\sigma^+\rangle = \sqrt{\frac{1-\rho^2}{2}}|L\rangle + \rho|S\rangle + \sqrt{\frac{1-\rho^2}{2}}|R\rangle, \quad (3)$$

$$|\sigma_1^-\rangle = \frac{\rho}{\sqrt{2}}|L\rangle - \sqrt{1-\rho^2}|S\rangle + \frac{\rho}{\sqrt{2}}|R\rangle, \quad (4)$$

$$|\sigma_2^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle - |R\rangle), \quad (5)$$

corresponding to eigenvalues 1, -1 , -1 , respectively. An initial state prepared at $x = 0$ can, thus, be conveniently written as $|\psi(t=0)\rangle = |0\rangle \otimes |\psi_c\rangle$ with

$$|\psi_c\rangle = \alpha|\sigma^+\rangle + \beta|\sigma_1^-\rangle + \gamma|\sigma_2^-\rangle. \quad (6)$$

Each of these parts plays a very specific role in the dynamics as shown in Ref. [34] in great detail. In particular, the

initial state $|\sigma_1^-\rangle$ alone does not lead to localization at the origin. Rather, its propagation resembles that of the two-state Hadamard quantum walk. Outcomes for each coin state can be assessed analytically via Fourier analysis and weak-limit theorems [38]. One can then approximate the spatial probability distribution in the long-time limit in terms of the group-velocity density $\omega(v)$. This was worked out first for the special case featuring $\rho = 1/\sqrt{3}$ [31] and later for arbitrary ρ using the Riemann-Lebesgue lemma [39]. For $|\psi_c\rangle = |\sigma_1^-\rangle$, the group-velocity density reads [34]

$$\omega(v) = \frac{\sqrt{1-\rho^2}}{\pi(1-v^2)\sqrt{\rho^2-v^2}}, \quad (7)$$

where $v = x/t$. The probability distribution for finite t follows directly as $P_x(t) = \omega(v)/t$. This readily indicates that the probability to find the particle at the origin goes to zero with time.

III. RESULTS

Our primary goal here is to look after dynamical scaling laws at the vicinity of the point where localization starts to take place. It means that the initial coin state $|\psi_c\rangle$ must overlap with, at least, another eigenstate besides $|\sigma_1^-\rangle$. If we set at the origin ($x = 0$) a symmetric initial state of the form

$$|\psi(t=0)\rangle = |0\rangle \otimes (\cos\theta|S\rangle + \sin\theta|\phi\rangle), \quad (8)$$

with $|\phi\rangle = (|L\rangle + |R\rangle)/\sqrt{2}$ and $\theta \in [0, \pi]$, the coefficients of Eq. (6) become $\alpha = (\rho \cos\theta + \sqrt{1-\rho^2} \sin\theta)$, $\beta = (\rho \sin\theta - \sqrt{1-\rho^2} \cos\theta)$, and $\gamma = 0$. We, thus, define a characteristic angle $\theta_c = \cos^{-1}(-\sqrt{1-\rho^2})$, which is the angle for which $\alpha = 0$ and $|\psi_0\rangle = |\sigma_1^-\rangle$. By definition, $\theta_c \in [\pi/2, \pi]$.

We are now ready to track the dynamics of such input walker state featuring a mixing angle θ between eigenstates that lead to localized and delocalized behaviors [34]. We set open boundary conditions and sizes N large enough so as to avoid the wave function from reaching the edges. Figure 1 shows the probability $P_x(t)$ evolution in space and time for three representative values of θ , including θ_c and $\rho = 1/\sqrt{3}$, which is the case of the standard Grover walk [30]. It clearly depicts that when $\theta = \theta_c$ the wave packet tends to a delocalized regime much like the two-state Hadamard quantum walk. As soon as $|\sigma^+\rangle$ is taken into account ($\theta \neq \theta_c$) a finite fraction of the wave packet remains trapped in the origin.

To better characterize the dynamical behavior in the vicinity of θ_c , we will take a look at the survival probability $\text{SP}(t) \equiv P_{x=0}(t)$ in Fig. 2(a). In the long-time regime, the survival probability saturates at a finite value due to onset of localization whereas $\text{SP} \sim t^{-1}$ when the mixing angle is right at θ_c as expected. This power-law decay in time of the survival probability is consistent with Eq. (7).

Another powerful tool to portray the walker dynamics is the participation ratio,

$$\text{PR}(t) = \frac{1}{\sum_x P_x(t)^2}, \quad (9)$$

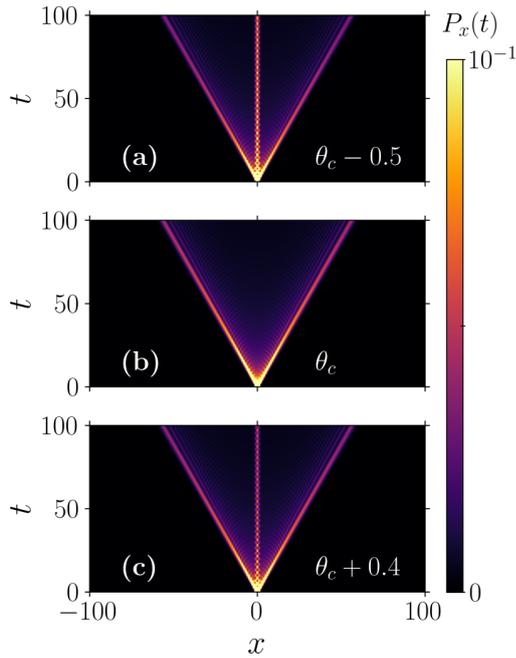


FIG. 1. Time evolution of occupation probability P_x for the three-state Grover walk ($\rho = 1/\sqrt{3}$) over 100 time steps for distinct values of θ . In general, part of the wave packet remains trapped at the origin except at θ_c which is when the initial coin state corresponds to $|\sigma_1^- \rangle$.

which accounts for the fraction of the wave packet spreading along the lattice. Whenever the system has a localized component, the participation ratio converges to a finite value since this term will take over the sum in Eq. (9). In the absence of that, it will become of the order of the spacial extension of the spreading wave packet and, as such, continuously grow in time. Since the three-state quantum walk has an intrinsic localization in the initial site for all $\theta \neq \theta_c$, one expects PR to saturate in the long-time regime. When the initial coin state is exactly $|\sigma_1^- \rangle$, the long-time behavior of the participation ratio can be extracted from Eq. (7). Assuming that the spacial extension of the wave packet becomes too large for long times, the discrete sum required to compute PR can be replaced by a continuous integral with the asymptotic spacial distribution $\omega(v)/t$. Integration by partial fractions then gives (see details in the Appendix),

$$\text{PR}(t) = \frac{at}{b + \ln(t)}, \quad (10)$$

where $a = a(\rho)$ and $b = b(\rho)$ are constants. This linear growth with a logarithmic correction is illustrated in Fig. 2(b) for the Grover walk.

It is important to stress here that the presence of such logarithmic correction has to be taken into account carefully as the convergence to the ultimate linear power-law growth is very slow. Numerically, the effective power-law behavior is estimated by the slope of the $\ln \text{PR} \times \ln t$ curve in a given time interval. As the presence of a logarithmic correction implies in a slowly varying effective exponent, it is useful to write $\text{PR} \propto t^{\lambda(t)}$ with

$$\lambda(t) = \frac{d \ln \text{PR}}{d \ln t}, \quad (11)$$

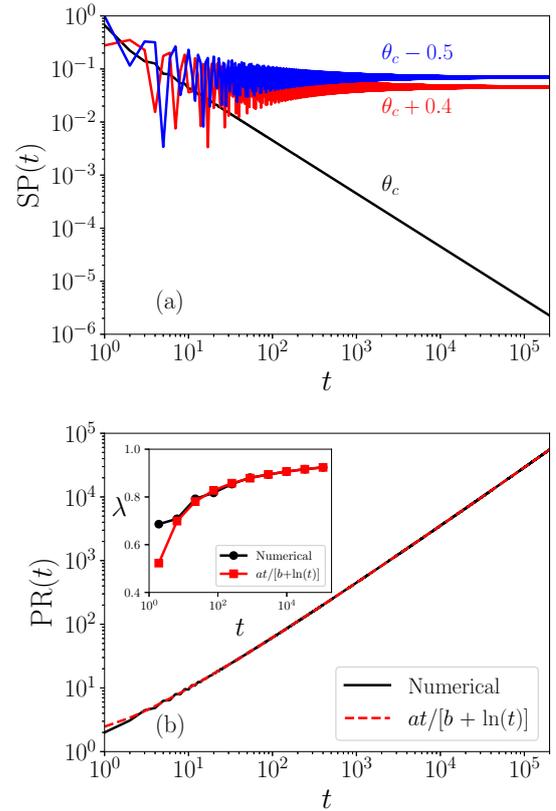


FIG. 2. (a) Time evolution of the survival probability (SP) for three mixing angles and $\rho = 1/\sqrt{3}$. In the absence of localization (θ_c), SP decays as $1/t$. (b) The participation ratio (PR) at θ_c . It grows according to the analytical prediction $\text{PR}(\theta_c) = at/[b + \ln(t)]$ with $a = 3.798$ and $b = 1.54$. The inset shows the time dependence of the effective power-law exponent. It evidences the slow convergence to the linear behavior $\lambda = 1$.

in which a term proportional to the rate of variation of $\lambda(t)$ was disregarded assuming $d(\ln \lambda)/d(\ln t) \ll \ln \lambda / \ln t$. The asymptotic behavior given by Eq. (10) implies that $\lambda(t) = 1 - 1/(b + \ln t)$, evidencing the very slow logarithmic convergence $\lambda(t \rightarrow \infty) \rightarrow 1$.

In the inset of Fig. 2(b) we show the time evolution of λ computed via numerical calculation of PR alongside the one derived from Eq. (10). Note that the asymptotic convergence to $\lambda = 1$ is actually very slow. As a matter of fact, such a logarithmic correction on the time evolution of the participation ratio is quite common in quantum walks with no localized component (e.g., two-state quantum walks) featuring group-velocity distribution singularities, such as those present in Eq. (7). Furthermore, we would also like to highlight that the sublinear time evolution of the participation ratio reported in previous studies [37] is nothing more than an effective description limited to a specific time interval. It hinders the logarithmic correction unveiled here, which is the true asymptotic behavior.

Let us now turn our attention to the dynamics occurring at the vicinity of θ_c . In Fig. 3(a), we show the survival probability of the Grover walk at distinct times as a function of θ so as to cover a variety of initial states. Once again, SP saturates to a

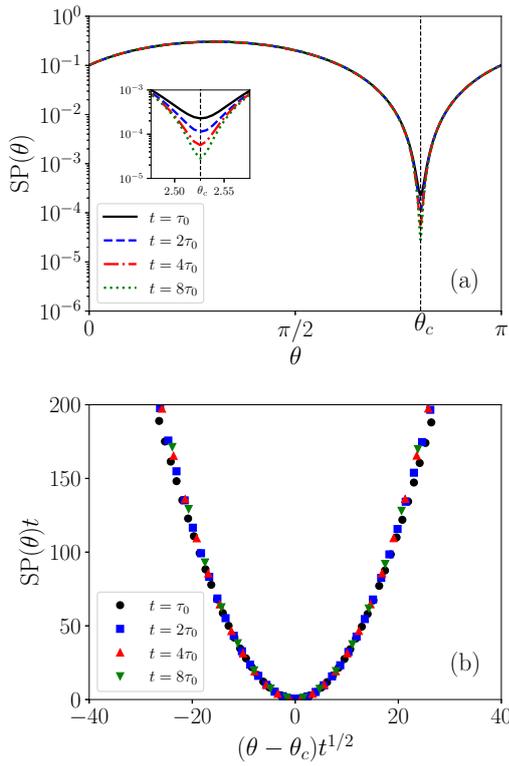


FIG. 3. (a) Survival probability as a function of θ evaluated at distinct time steps with $\tau_0 = 2000$. It converges quickly to a finite value except at the characteristic angle θ_c . (b) Collapse of SP in the vicinity of θ_c , showing a universal scaling law.

fixed value except at the vicinity of the critical parameter θ_c , that is, where it scales as $SP \sim t^{-1}$. In this region data can be collapsed into a single universal curve by relying on the fact that in the long-time limit, SP decays as $SP \propto (\theta - \theta_c)^2$. This quadratic behavior takes place as the overlap between $|\sigma^+\rangle$ and the initial state α vanishes linearly. In association with the $1/t$ decay at θ_c discussed before, we can, thus, rewrite the survival probability in a single-parameter scaling form as

$$SP(\theta, t) = t^{-1} f[(\theta - \theta_c)t^{1/2}], \quad (12)$$

with $f(0)$ being a constant and $f(\eta \gg 1) \propto \eta^2$. This is depicted in Fig. 3(b) where we plot $t \times SP$ as a function of the scaling variable $(\theta - \theta_c)t^{1/2}$. The collapse resulting from the curves obtained from distinct time steps corroborates the proposed single-parameter scaling in the vicinity of θ_c . Most importantly, this is independent of the coin parameter ρ and, thus, can be considered as a universal dynamical scaling law for the present three-state quantum walk model.

We also analyze the PR = PR(θ) for distinct time steps as illustrated in Fig. 4(a). As discussed previously, PR saturates to a finite value due to the localization occurring at the origin. It is only at θ_c that PR grows linearly with the reported logarithmic correction. However, finite-time corrections take place close to θ_c . In the long-time regime $t \rightarrow \infty$, PR will diverge as $PR \propto (\theta - \theta_c)^{-4}$. Such a law results from the very definition

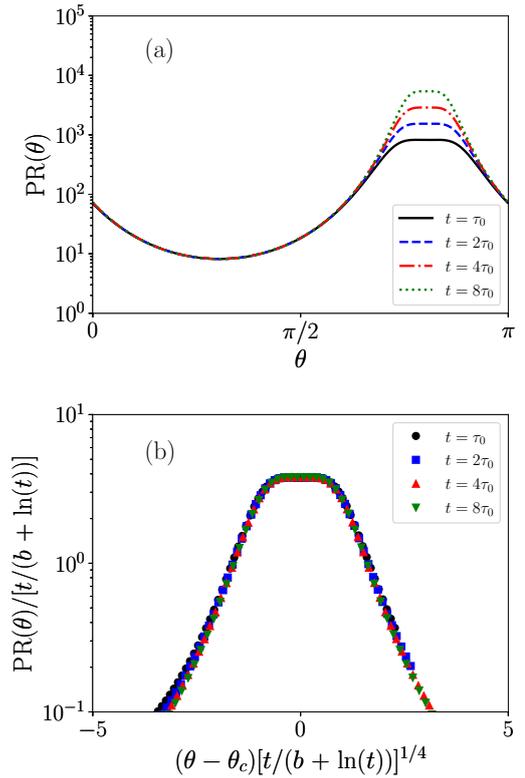


FIG. 4. (a) Participation ratio as a function of θ for distinct time steps with $\tau_0 = 2000$. (b) Data collapse unveiling a universal scaling law in the vicinity of θ_c .

of PR that takes the squared survival probability as input. The participation ratio can also be written in a single-parameter scaling form that incorporates both asymptotic behaviors, such as

$$PR(\theta, t) = \tilde{t} g[(\theta - \theta_c)\tilde{t}^{1/4}], \quad (13)$$

where $\tilde{t} = t/(b + \ln t)$, $g(0)$ is a constant, and $g(\eta \gg 1) \propto \eta^{-4}$. Data collapse is shown in Fig. 4(b) where we plot PR/\tilde{t} as a function of the scaling variable $(\theta - \theta_c)\tilde{t}^{1/4}$. Once again, the collapse is accurate, thus, supporting both the single-parameter dynamic scaling hypothesis and the logarithmic correction to the relevant timescale.

Last but not least, we report the dependence of the wave packet spreading dynamics on the coin parameter ρ . A density plot of the participation ratio as a function of both ρ and θ evaluated at the long-time regime is shown in Fig. 5. It becomes large at the locus $\theta_c = \cos^{-1}(-\sqrt{1 - \rho^2})$. However, the degree of wave packet delocalization is nonuniform and reaches its maximum when the coin parameter approaches that of the Grover walk $\rho = 1/\sqrt{3}$.

IV. CONCLUDING REMARKS

We have studied the dynamics of a general three-state quantum walk where the coin operator allows for a continuous tuning from a nonpropagating regime $\rho = 0$ to a nonmixing regime $\rho = 1$ between the left and the right side components.

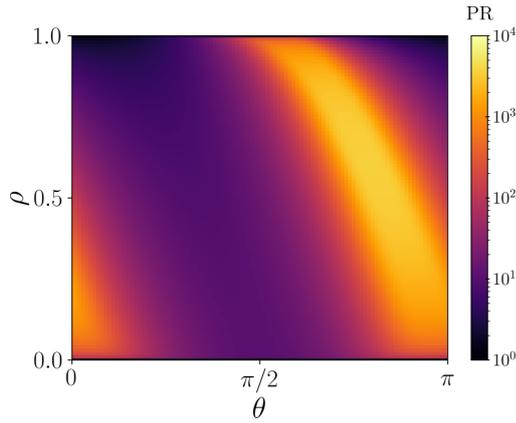


FIG. 5. Density plot of the participation ratio PR in the ρ vs θ parameter space evaluated at $t = 10^4$ (long-time regime). Delocalization is pronounced at $\theta_c = \cos^{-1}(-\sqrt{1-\rho^2})$ with maximum wave packet spreading being reached as the Grover walk condition $\rho = 1/\sqrt{3}$ is approached.

We set as input an effective two-level state whose relative phase parametrized by an angle θ weights the contribution of the coin eigenstates that leads to delocalized and localized dynamical regimes.

Full delocalization was shown to occur only at $\theta = \theta_c$ where the survival probability $SP \propto 1/t$. A detailed analysis of the wave packet dynamics was then carried out around that point, and we unveiled a single-parameter dynamical scaling law of the form $SP = t^{-1}f(\eta)$ with $\eta = (\theta - \theta_c)t^{1/2}$. The scaling function $f(\eta \gg 1) \propto \eta^2$ accounts for the long-time quadratic decay of the survival probability as θ_c is approached.

We also showed that the PR grows linearly in time with a logarithmic correction of the form $PR \propto t/(b + \ln t)$. This feature is present in delocalized quantum walks, such as the two-state Hadamard quantum walk, having an asymptotic distribution with group-velocity distribution singularities as found in Eq. (7). This logarithmic correction uncovers the actual mechanism underneath the effective sublinear dynamics reported in Ref. [37], for instance.

The participation ratio was found to satisfy a single-parameter scaling law $PR \propto \tilde{t}g(\eta)$ with $\tilde{t} = t/(b + \ln t)$ and $\eta = (\theta - \theta_c)\tilde{t}^{1/4}$. The scaling function $g(\eta \gg 1) \propto \eta^4$, thus, accounting for the long-time divergence of $PR \propto (\theta - \theta_c)^{-4}$ in the vicinity of θ_c .

The above scaling laws worked out here are universal and hold for all values of the coin parameter ρ for the three-state quantum walk. However, the degree of delocalization at θ_c depends nonmonotonically on ρ , reaching the maximum as the Grover walk condition $\rho = 1/\sqrt{3}$ is fulfilled. The finite-time scaling analysis employed here can be extended to bring about hidden features underlying several families of quantum walks, including those whose dynamics is already well established. This is of great importance for the design of quantum algorithms. Seeking for universal dynamical laws in discrete-time quantum walks also make for a better understanding over their connections with Hamiltonian models, allowing for progress in physical implementations.

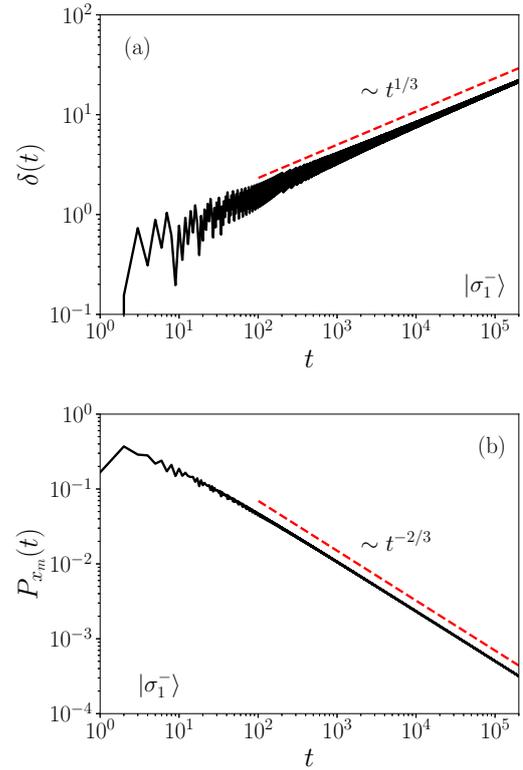


FIG. 6. (a) Sublinear time evolution of $\delta(t) = \rho t - x_m$, evidencing $\delta \propto t^{1/3}$; (b) time dependence of the occupation probability at the wave-front P_{x_m} indicating its power-law decay $P_{x_m} \propto t^{-2/3}$.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially supported by Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal do Nível Superior (CAPES), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), and Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Alagoas (FAPEAL).

APPENDIX

In this Appendix, we carry out the derivation of Eq. (10). Considering the initial state $|\sigma_1^-\rangle$, the long-time behavior of the participation ratio can be analytically extracted using the group-velocity density given by Eq. (7). The inverse participation ratio is given by

$$[PR(t)]^{-1} = \sum_x P_x(t)^2 = \sum_x [\omega(v)/t]^2, \quad (\text{A1})$$

with $v = x/t$ and the sum extending over the wave packet support whose fronts evolve ballistically in time with velocity ρ . The wave-front positions are at $x_m = \pm(\rho t - \delta)$ with δ being a positive sublinear correction. In Fig. 6(a) we depict the numerically obtained time-dependence $\delta(t) \propto t^{1/3}$ for which the wave front was considered to be the position of the wave distribution maximum. Such a sublinear correction actually avoids a true divergence of the probability density at the wave front. According to Eq. (7), $\omega(v_m = x_m/t) \propto \sqrt{t/\delta(t)}$ in the long-time regime. This implies that the probability density at the wave front is $P_{x_m}(t) \propto t^{-2/3}$ as made clear in Fig. 6(b).

Replacing the sum over x with a sum over ν in Eq. (A1), we get

$$[\text{PR}(t)]^{-1} = \sum_{\nu=-(\rho-\delta/t)}^{\rho-\delta/t} [\omega(\nu)/t]^2, \quad (\text{A2})$$

where the interval between successive values of ν is $\Delta\nu = 1/t$. Therefore, in the long-time regime, the last sum can be turned into an integral of the form

$$\begin{aligned} [\text{PR}(t)]^{-1} &= \int_{-(\rho-\delta/t)}^{\rho-\delta/t} \frac{\omega^2}{t} d\nu \\ &= \frac{1-\rho^2}{\pi^2 t} \int_{-(\rho-\delta/t)}^{\rho-\delta/t} \frac{d\nu}{(1-\nu^2)^2(\rho^2-\nu^2)}. \end{aligned} \quad (\text{A3})$$

One can then highlight its time dependence via the partial fraction decomposition,

$$\begin{aligned} \frac{1}{(1-\nu^2)^2(\rho^2-\nu^2)} &= \frac{A}{(1-\nu^2)^2} + \frac{B}{1-\nu^2} \\ &\quad + \frac{C}{\rho-\nu} + \frac{D}{\rho+\nu}. \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

The integrals of the first two terms converge to finite values as $t \rightarrow \infty$ whereas the last two diverge as $\ln t$ due to the group-velocity distribution singularities at $\nu = \pm\rho$. Consequently, the long-time inverse participation ratio decays as $[\text{PR}(t)]^{-1} = (1/at)(b + \ln t)$, unveiling a logarithmic correction to the linear long-time evolution of the participation ratio.

-
- [1] Y. Aharonov, L. Davidovich, and N. Zagury, *Phys. Rev. A* **48**, 1687 (1993).
- [2] N. Shenvi, J. Kempe and K. Birgitta Whaley, *Phys. Rev. A* **67**, 052307 (2003).
- [3] A. M. Childs and J. Goldstone, *Phys. Rev. A* **70**, 022314 (2004).
- [4] A. M. Childs and Y. Ge, *Phys. Rev. A* **89**, 052337 (2014).
- [5] T. G. Wong, *J. Phys. A: Math. Theor.* **48**, 435304 (2015).
- [6] T. G. Wong, *Quantum Inf. Process.* **17**, 68 (2018).
- [7] X. Zhan, H. Qin, Z. H. Bian, J. Li, and P. Xue, *Phys. Rev. A* **90**, 012331 (2014).
- [8] M. Štefaňák and S. Skoupý, *Phys. Rev. A* **94**, 022301 (2016).
- [9] P. Kurzyński and A. Wójcik, *Phys. Rev. A* **83**, 062315 (2011).
- [10] P. L. Knight, E. Roldán, and J. E. Sipe, *Phys. Rev. A* **68**, 020301(R) (2003).
- [11] A. M. Childs, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 180501 (2009).
- [12] N. B. Lovett, S. Cooper, M. Everitt, M. Trevers, and V. Kendon, *Phys. Rev. A* **81**, 042330 (2010).
- [13] J. Kempe, *Contemp. Phys.* **44**, 307 (2003).
- [14] S. E. Venegas-Andraca, *Quantum Inf. Process.* **11**, 1015 (2012).
- [15] I. Vakulchyk, M. V. Fistul, and S. Flach, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 040501 (2019).
- [16] C. M. Chandrashekar and R. Laflamme, *Phys. Rev. A* **78**, 022314 (2008).
- [17] K. Wang, X. Qiu, L. Xiao, X. Zhan, Z. Bian, W. Yi, and P. Xue, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 020501 (2019).
- [18] X. P. Wang, L. Xiao, X. Z. Qiu, K. K. Wang, W. Yi, and P. Xue, *Phys. Rev. A* **98**, 013835 (2018).
- [19] C. Navarrete-Benlloch, A. Pérez, and E. Roldán, *Phys. Rev. A* **75**, 062333 (2007).
- [20] A. R. C. Buarque and W. S. Dias, *Phys. Rev. A* **101**, 023802 (2020).
- [21] J. P. Mendonça, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, and G. M. A. Almeida, *Phys. Rev. A* **101**, 062335 (2020).
- [22] A. R. C. Buarque and W. S. Dias, *Phys. Rev. A* **103**, 042213 (2021).
- [23] T. Kitagawa, M. S. Rudner, E. Berg, and E. Demler, *Phys. Rev. A* **82**, 033429 (2010).
- [24] J. K. Asbóth, *Phys. Rev. B* **86**, 195414 (2012).
- [25] T. Rakovszky and J. K. Asbóth, *Phys. Rev. A* **92**, 052311 (2015).
- [26] H. Obuse and N. Kawakami, *Phys. Rev. B* **84**, 195139 (2011).
- [27] C. V. C. Mendes, G. M. A. Almeida, M. L. Lyra, and F. A. B. F. de Moura, *Phys. Rev. E* **99**, 022117 (2019).
- [28] A. R. C. Buarque and W. S. Dias, *Phys. Rev. E* **100**, 032106 (2019).
- [29] M. A. Pires and S. M. Duarte Queirós, *Phys. Rev. E* **102**, 012104 (2020).
- [30] N. Inui, N. Konno, and E. Segawa, *Phys. Rev. E* **72**, 056112 (2005).
- [31] S. Falkner and S. Boettcher, *Phys. Rev. A* **90**, 012307 (2014).
- [32] N. Konno, *Quantum Inf. Process.* **13**, 1103 (2014).
- [33] M. Štefaňák, I. Bezděková and I. Jex, *Eur. Phys. J. D* **66**, 142 (2012).
- [34] M. Štefaňák, I. Bezděková and I. Jex, *Phys. Rev. A* **90**, 012342 (2014).
- [35] T. G. Wong, *J. Phys. A: Math. Theor.* **50**, 475301 (2017).
- [36] A. Saha, S. B. Mandal, D. Saha, and A. Chakrabarti, *IEEE Trans. Quant. Eng.* **2**, 3102012 (2021).
- [37] S. Omanakuttan and A. Lakshminarayan, *J. Phys. A: Math. Theor.* **51**, 385306 (2018).
- [38] G. Grimmett, S. Janson, and P. F. Scudo, *Phys. Rev. E* **69**, 026119 (2004).
- [39] T. Machida, *Quantum Inf. Comput.* **15**, 406 (2015).