

Passeios Quânticos em Árvores Subdivididas

Emanuel Juliano¹

Orientador: Gabriel Coutinho¹

¹Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG)

{emanuelsilva, gabriel}@dcc.ufmg.br

Resumo. Nós consideramos árvores com dois vértices conectados por uma aresta subdividida e mostramos que transferência quântica de estado não pode ocorrer entre esses vértices, a menos que o grafo não possua mais nenhum outro vértice. Chegamos a esse resultado demonstrando a existência de autovaleiros próximos no suporte dos vértices e apresentamos diversos exemplos de árvores e suas relações com o teorema de transferência perfeita de estado, para isso, primeiro apresentamos um limitante superior para a distância entre os dois vértices e para os casos restantes demonstramos individualmente a não existência do fenômeno.

1. Introdução

Seja X um grafo que modela a interação de qubits em uma rede. Dada uma configuração inicial do sistema, a evolução temporal é determinada pela matriz

$$U(t) = \exp(itA),$$

onde $t \in \mathbb{R}_+$ e $A = A(X)$, a matriz de adjacência de X . Nessa proposta utilizaremos a notação bra-ket: um vértice a do grafo é representado pelo vetor característico $|a\rangle$. Sua função dual é denotada por $\langle a|$. Nós diremos que X admite transferência perfeita de estado entre a e b no tempo t se [Coutinho 2014]

$$|\langle b|U(t)|a\rangle| = 1.$$

Transferência perfeita de estado é um fenômeno desejável para diversas aplicações relacionadas a informação quântica e mesmo assim é difícil de se obter.

A **subdivisão** de uma aresta é a inserção de um novo vértice v_j o meio de uma aresta existente $e = v_i v_k$, acompanhada da união das pontas originais da aresta ao novo vértice inserido, formando as arestas $e' = v_i v_j$ e $e'' = v_j v_k$ [Gross and Yellen 2006]. Nossa investigação na proposta está relacionada a existência de transferência perfeita de estado em árvore subdivididas, isto é, dada um árvore e dois vértices adjacentes, perguntamos se é possível existir transferência perfeita de estado após várias (ou nenhuma) operação de subdivisão na aresta entre eles 1.

2. Trabalhos Relacionados

O fenômeno de transferência perfeita de estado é utilizado por [Childs et al. 2003] no Glued-Tree Problem, nesse problema duas árvores binárias são “grudadas” em suas folhas e a partir da raiz de uma, queremos chegar na raiz da outra, de modo que a única

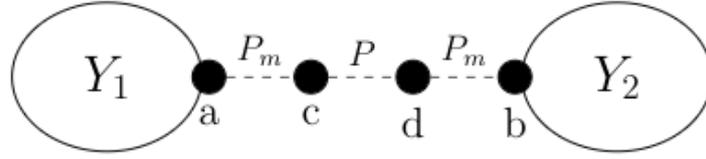


Figura 1. Grafos a serem estudados. A pergunta a ser respondida é se existe transferência de estado entre a e b . Y_1 e Y_2 correspondem a árvores arbitrárias.

informação que temos é a vizinhança do vértice atual. Apesar de não se conhecer um algoritmo clássico que resolve esse problema de forma eficiente, utilizando de passeios quânticos os autores descobrem um algoritmo polinomial.

Os grafos P_n com $n = 2$ ou $n = 3$ vértices admitem o fenômeno, porém nenhum outro caminho admite [Christandl et al. 2005] e não se conhece nenhuma outra árvore que admita [Coutinho and Liu 2015].

As famílias infinitas de grafos conhecidos que admitem transferência de estado todas possuem um crescimento exponencial comparada a distância entre os dois vértices envolvidos, mesmo que os limitantes para construir redes quânticas sugerirem que a configuração desejável deveria ter crescimento polinomial [Kay 2018].

Ao permitir pesos nas arestas, é possível atingir transferência de estado em caminhos, mas novamente, as famílias conhecidas requerem grandes pesos no centro da cadeia. Uma questão advinda da literatura [Casaccino et al. 2009] é a pergunta de se é possível atingir transferência de estado em caminhos manipulando os pesos dos loops adicionados na ponta da cadeia somente. Mas em [Kempton et al. 2017], essa pergunta foi respondida de forma negativa.

Também demonstrando cenários em que transferência de estado não ocorre, [Coutinho et al. 2022] demonstra que para vértices conectados por uma ponte ou por uma subdivisão de uma ponte não admitem o fenômeno, em nosso trabalho, demonstramos o resultado para árvores nas quais ocorreram subdivisões maiores da aresta conectando os dois vértices.

3. Transferência Perfeita de Estado

Dado um grafo X com n vértices e matriz de adjacência A , a decomposição espectral de A é denotada por

$$A = \sum_{r=0}^d \theta_r E_r,$$

assumimos que existem $d + 1$ autovalores distintos θ_r , com projetores correspondentes E_r . Nós assumimos que o grafo é conexo, θ_0 é seu maior autovalor, e logo E_0 é uma matriz com entradas positivas ([Brouwer and Haemers 2012, Section 2.2]). Então,

$$U(t) = \exp(itA) = \sum_{r=0}^d e^{it\theta_r} E_r,$$

e podemos verificar que, para $a, b \in V(X)$, existe t tal que $|\langle b|U(t)|a \rangle| = 1$ se e somente se existe $\gamma \in \mathbb{C}$ com $|\gamma| = 1$ tal que $U(t)|a \rangle = \gamma|b \rangle$. Essa equação é equivalente a ter, para todo $r \in \{0, \dots, d\}$,

$$e^{it\theta_r} E_r|a \rangle = \gamma E_r|b \rangle,$$

que é equivalente a ter, simultaneamente, para todo r ,

- (a) $E_r|a \rangle = \sigma_r E_r|b \rangle$, com $\sigma_r \in \{-1, +1\}$, e
- (b) sempre que $E_r|a \rangle \neq 0$, então $t(\theta_0 - \theta_r) = k_r \pi$, com $k_r \in \mathbb{Z}$, e além disso $k_r \equiv (1 - \sigma_r)/2 \pmod{2}$.

Dois vértices que satisfazem a condição (a) são chamados de *fortemente cospectrais*. Note que isso implica que $\langle a|E_r|a \rangle = \langle b|E_r|b \rangle$ para todo r , que é uma condição mais fraca e mais conhecida que implica que os vértices são cospectrais. Podemos verificar que vértices cospectrais satisfazem $\langle a|A^k|a \rangle = \langle b|A^k|b \rangle$ para todo k , e portanto devem ter o mesmo grau.

Autovalores θ_r para os quais $E_r|a \rangle \neq 0$ são ditos pertencer ao *suporte de autovalores* de a .

Godsil mostrou que a condição (b) acima implica que os autovalores são ou inteiros ou inteiros quadráticos de uma forma especial [Godsil 2012], e disso, obtemos a seguinte caracterização para transferência perfeita de estado ([Coutinho 2014, Chapter 2]).

Teorema 3.1. *Seja X um grafo, e seja $a, b \in V(X)$. Existe transferência perfeita de estado ente a e b no tempo t se e somente se as condições a seguir são satisfeitas.*

- (a) $E_r|a \rangle = \sigma_r E_r|b \rangle$, com $\sigma_r \in \{-1, +1\}$.
- (b) Existe um inteiro α , um inteiro positivo livre de raiz Δ (possivelmente igual a 1), tal que para todo θ_r no suporte de a , existe um β_r tal que

$$\theta_r = \frac{\alpha + \beta_r \sqrt{\Delta}}{2}.$$

Em particular, como θ_r é um inteiro algébrico, segue-se que todo β_r possui a mesma paridade de α .

- (c) Existe um $g \in \mathbb{Z}$ tal que, para todo θ_r no suporte de a , $(\beta_0 - \beta_r)/g = k_r$, com $k_r \in \mathbb{Z}$, e $k_r \equiv (1 - \sigma_r)/2 \pmod{2}$.

Se as condições são válidas, então os valores positivos de t para os quais transferência perfeita de estado ocorre são precisamente os múltiplos ímpares de $\pi/(g\sqrt{\Delta})$.

Nosso objetivo é demonstrar a não existência de transferência perfeita de estado em uma classe de grafos. Portanto, iremos apresentar diversos exemplos para os quais tal transferência falha e, a partir de uma análise dos motivos, identificar a melhor forma de abordar nosso problema.

3.1. Grafos que falham condição (a) de 3.1

A condição (a) se refere a uma propriedade dos vértices a e b , sem depender dos autovalores do grafo. Essa condição nos garante que os dois vértices possuem um grau de semelhança e pode ser decomposta em outras duas condições que revelam mais propriedades sobre a estrutura dos vértices.

3.1.1. Vértices Cospectrais

$$\frac{1}{4} \begin{pmatrix} \textcircled{1} & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & \textcircled{1} \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \textcircled{1} & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & \textcircled{1} \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \textcircled{1} & -\sqrt{2} & 1 \\ -\sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & \textcircled{1} \end{pmatrix}$$

Figura 2. Decomposição espectral do P_3 , percebemos que vértices 1 e 3 são cospectrais.

Dizemos que dois vértices a e b são **cospectrais** se, para todo r , $(E_r)_{a,a} = (E_r)_{b,b}$ [Gabriel Coutinho 2020]. Essa definição nos permite relacionar vértices cospectrais a vértices fortemente cospectrais, mas não revela muita estrutura sobre os vértices, portanto, outras equivalências se tornam mais úteis na busca por vértices cospectrais em grafos:

- (1) Vértices a e b são fortemente cospectrais se e somente se $\phi(X \setminus a, t) = \phi(X \setminus b, t)$.
- (2) Vértices a e b são fortemente cospectrais se e somente se, para todo inteiro k , $(A^k)_{a,a} = (A^k)_{b,b}$.

Podemos agora utilizar essas equivalências para tirar conclusões sobre quando vértices são candidatos a serem cospectrais. Por exemplo, se os vértices a e b forem similares, isto é, existir um automorfismo em X que mapeia a para b , então a condição (1) se torna trivialmente satisfeita, isto é, **vértices similares são sempre cospectrais**. Além disso, a condição (2) nos fornece uma equivalência combinatória para o conceito de cospectralidade, uma implicação direta dessa equivalência é que **vértices cospectrais precisam ter mesmo grau**.

3.1.2. Vértices Paralelos

$$\frac{1}{4} \begin{pmatrix} \textcircled{1} & \sqrt{2} & \textcircled{1} \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & \textcircled{1} \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \textcircled{1} & 0 & \textcircled{-1} \\ 0 & 0 & 0 \\ \textcircled{-1} & 0 & \textcircled{1} \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \textcircled{1} & -\sqrt{2} & \textcircled{1} \\ -\sqrt{2} & 2 & \textcircled{-\sqrt{2}} \\ \textcircled{1} & -\sqrt{2} & \textcircled{1} \end{pmatrix}$$

Figura 3. Decomposição espectral do P_3 , percebemos que vértices 1 e 3 são paralelos.

Dizemos que dois vértices a e b são **paralelos** se, para todo r , $(E_r)_a = \alpha_r (E_r)_b$, ou seja, as colunas das idempotentes são linearmente paralelas [Gabriel Coutinho 2020].

Assim como no caso de vértices cospectrais, vértices paralelos também possuem uma equivalência que nos será útil no futuro.

- Vértices a e b são paralelos se e somente se os polos da função racional $\phi(X \setminus \{a, b\}, t) / \phi(X, t)$ são simples.

Apesar da segunda condição não relevar propriedades estruturais claras na identificação de vértices paralelos, a sua definição nos revela uma propriedade interessante: **se um grafo possui autovalores simples, então todos os vértices são paralelos entre si**, essa propriedade fica clara ao perceber que, se o grafo possui autovalores simples, então o posto de suas idempotentes é 1 e portanto todas as colunas são linearmente dependentes.

3.1.3. Cospectral + Paralelo = Fortemente Cospectral

$$\frac{1}{4} \begin{pmatrix} \textcircled{1} & \sqrt{2} & \textcircled{1} \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & \textcircled{1} \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \textcircled{1} & 0 & \textcircled{-1} \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & \textcircled{1} \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \textcircled{1} & -\sqrt{2} & \textcircled{1} \\ -\sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & \textcircled{1} \end{pmatrix}$$

Figura 4. Decomposição espectral do P_3 , vértices 1 e 2 são fortemente cospectral

Como descrito anteriormente, vértices a e b são fortemente cospectrais se, para todo r , $(E_r)_a = \pm(E_r)_b$ e essa é uma condição necessária para PST.

Lema 3.1. *Dois vértices a e b são fortemente cospectrais se e somente se eles são paralelos e cospectrais.*

Demonstração. Claramente se dois vértices são fortemente cospectrais eles são paralelos, para observar que eles são cospectrais basta lembrar a propriedade de projetores que $E_r^2 = E_r$, portanto

$$(E_r)_{a,a} = (E_r)_a^T (E_r)_a = (\pm(E_r)_b)^T (\pm(E_r)_b) = (E_r)_b^T (E_r)_b = (E_r)_{b,b}$$

Para mostrar o outro lado da implicação, começamos assumindo que os vértices são paralelos, logo $(E_r)_a = \alpha_r (E_r)_b$ para algum $\alpha_r \in \mathbb{R}$, logo

$$(E_r)_{a,a} = \alpha_r (E_r)_{a,b} = \alpha_r (E_r)_{b,a} = \alpha_r^2 (E_r)_{b,b}$$

Mas assumindo que a e b são cospectrais, $\alpha_r^2 = 1$, portanto $\alpha_r = \pm 1$. □

Agora que demonstramos a decomposição, podemos analisar exemplos de vértices fortemente cospectrais e exemplos que falham em satisfazer essa condição.

Teorema 3.2. *Vértices equidistantes em caminhos são fortemente cospectrais.*

Demonstração. Como esses vértices são similares, então também são cospectrais, além disso, os autovalores do P_n são [Gabriel Coutinho 2020]

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

Portanto, todos os vértices do P_n são paralelos. □

O P_n é um tipo de árvore subdividida, portanto o caminho para demonstrar a não existência de transferência perfeita de estado nessas árvores não será demonstrando que os vértices falham ao satisfazer a condição (1), portanto, focaremos nas outras condições.

Apesar disso, apresentaremos mais exemplos de árvores e suas relações com a condição (1), em especial, exemplos importantes de árvores com vértices cospectrais mas não paralelos.

Um exemplo importante a ser mencionado são as estrelas S_n , ou $K_{1,n-1}$ com $n \geq 4$, para essas árvores é fácil perceber que as folhas são par a par cospectrais, porém não são paralelas. A razão para elas não serem paralelas deriva do teorema:

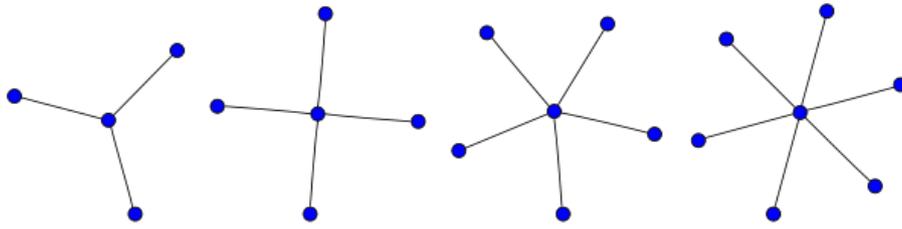


Figura 5. Estrelas S_4, S_5, S_6 e S_7

Teorema 3.3. *Se a e b são vértices fortemente cospectrais em X , então qualquer automorfismo de X que fixa a também deve fixar b*

Demonstração. Seja P uma matriz de permutação que define um automorfismo π que fixa a .

Lema 3.2. *π é um automorfismo de X se e somente se a matriz de permutação P definida por π comuta com A , isto é $AP = PA$.*

Demonstração. Segue diretamente do fato que π é um automorfismo de X se e somente se $PAP^t = A$, uma vez que $P^t = P^{-1}$. \square

Além desse lema, também precisaremos do seguinte fato:

Lema 3.3. *As idempotentes E_r podem ser escritas como um polinômio de A , isto é $E_r = p(A)$ para algum polinômio p de grau $\leq n$.*

Demonstração. Relembramos a decomposição espectral de A como $A = \sum_r \theta_r E_r$. Assim, um polinômio aplicado a A pode ser descrito utilizando a decomposição espectral como

$$p(A) = \sum_r p(\theta_r) E_r,$$

Sendo assim, queremos um polinômio que vale 0 para todo autovalor $\theta_s \neq \theta_r$ e que $p(\theta_r) = 1$. Construímos esse polinômio utilizando a fórmula de Lagrange, assumindo que A possui k autovalores distintos:

$$p_r(x) = \prod_{0 \leq s < k, s \neq r} \frac{x - \theta_s}{\theta_r - \theta_s}$$

\square

Assim, sabendo que P comuta com A , sabemos que ele também comuta com suas idempotentes e portanto demonstramos o resultado seguindo as igualdades:

$$\begin{aligned}
E_r P|a\rangle &= \pm E_r P|b\rangle \\
E_r |a\rangle &= \pm E_r |c\rangle \\
E_r |b\rangle &= E_r |c\rangle \\
\sum_{r=0}^d E_r |b\rangle &= \sum_{r=0}^d E_r |c\rangle \\
I|b\rangle &= I|c\rangle \\
|b\rangle &= |c\rangle
\end{aligned}$$

Portanto, se π fixa a , ele também fixa b . □

O que esse teorema sugere é que, em termos de automorfismo, uma condição que garante vértices serem cospectrais é o fato deles serem similares, mas o que impede eles de serem paralelos é a existência de outros vértices similares no grafo e de um automorfismo que fixa um dos vértices mas não o outro, como é o caso das estrelas.

O fenômeno acima levanta perguntas muito interessantes, como por exemplo: "Existem 3 vértices fortemente cospectrais em uma árvore?". O que torna essa pergunta interessante é que existem grafos com mais de um par de vértices fortemente cospectrais, como na figura 3.1.3, mas para construir essa estrutura em uma árvore seria necessário uma técnica não trivial, uma vez que a construção mais intuitiva, partindo de estrelas e floreado as pontas falha ao satisfazer o teorema 3.3.

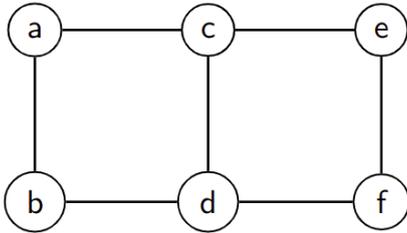


Figura 6. O grafo acima, $P_2 \square P_3$, possui 4 vértices fortemente cospectrais, suas 4 quinas.

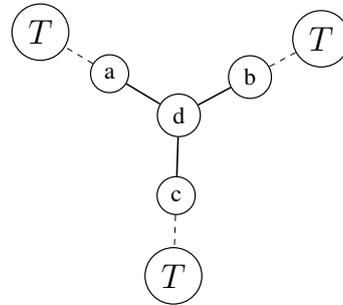


Figura 7. Construção falha para gerar 3 vértices fortemente cospectrais.

Por fim, apresentamos um exemplo que satisfaz as condição do teorema (1), mas a árvore não é nada simétrica, a Schvenk Tree 8

3.2. Grafos que falham condição (b) de 3.1

Como não é esperado nossa construção falhar para a condição (a) de 3.1, iremos argumentar sobre a condição (b). A parte mais importante sobre a condição é que **se existe transferência de estado de a para b , então os autovalores do suporte precisam estar espaçados a uma distância de pelo menos 1.**

Apesar de não parecer, exigir esse espaçamento implica em propriedades relevantes para nosso grafo.

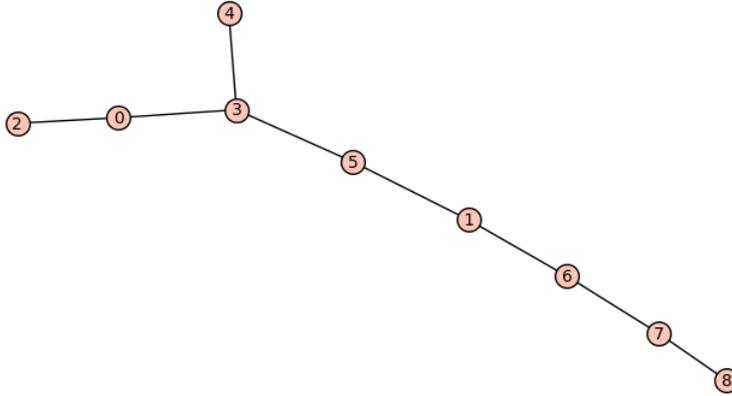


Figura 8. Schvenk Tree

Teorema 3.4. *Seja X uma árvore com PST entre vértices a e b , tal que $\text{dist}(a, b) = r$. Então, X possui $\mathcal{O}(r^3)$ arestas.*

Demonstração. Seja S o conjunto de autovalores no suporte de a , queremos maximizar o número de autovalores no suporte de a dado que,

$$\sum_{\lambda_i \in S} \lambda_i^2 \leq 2m \quad |\lambda_i| - |\lambda_{i-1}| \geq 1$$

Em que a primeira desigualdade decorre do fato de que o traço de A^2 é igual à soma dos graus dos vértices e a segunda desigualdade vem de assumirmos espaçamento entre os autovalores.

Seja $S_+ \subseteq S$ o conjunto de todos os autovalores positivos de S , assumamos que $|S| = s$, listamos eles de modo que $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_s$.

Como nosso grafo é bipartido,

$$\sum_{\lambda_i \in S_+} \lambda_i^2 \leq m \quad |\lambda_i| - |\lambda_{i-1}| \geq 1$$

Queremos encontrar um limite superior para s , portanto, podemos assumir que cada um de seus termos assumem o menor valor possível e que seu menor termo é 1. Em outras palavras, queremos encontrar o maior valor de s tal que

$$\sum_{i=1}^s i^2 \leq m$$

Mas como $\sum_{i=1}^s i^2 = s(s+1)(2s+1)/6$

$$\begin{aligned}
s &\leq \frac{1}{2} \left(\frac{\sqrt[3]{\sqrt{3}\sqrt{3888m^2 - 1} + 108m}}{\sqrt[3]{3^2}} + \frac{1}{\sqrt[3]{3}\sqrt[3]{\sqrt{3}\sqrt{3888m^2 - 1} + 108m}} - 1 \right) \\
&< \frac{1}{2} \frac{\sqrt[3]{\sqrt{3}\sqrt{3888m^2 - 1} + 108m}}{\sqrt[3]{3^2}} \\
&< \frac{1}{2} \sqrt[3]{24m}
\end{aligned}$$

É conhecido o resultado de que o número de autovalores distintos no suporte de um vértice é maior que seu diâmetro [Gabriel Coutinho 2020], logo,

$$r + 1 \leq |S| \leq 2s + 1 < \sqrt[3]{24m} + 1$$

E chegamos no limitante

$$r < 2\sqrt[3]{3m}$$

□

Apesar de termos restringido o teorema acima para árvores, esse corresponde ao seu pior caso, isto é, o limitante é válido para qualquer grafo.

A seguir apresentamos um exemplo de árvores que satisfazem o limitante com igualdade assintótica. Construiremos uma árvore T com $|T| = cr^3$, $Diam(T) = r + 1$ e $2r - 1$ autovalores distintos de modo que todos os autovalores possuem distância pelo menos 1.

Construímos T_r de forma recursiva:

- $T_2 = S_4$
- T_r é uma estrela S_{r-2} , com uma das folhas substituídas por T_{r-1}

Ex. T_3 :

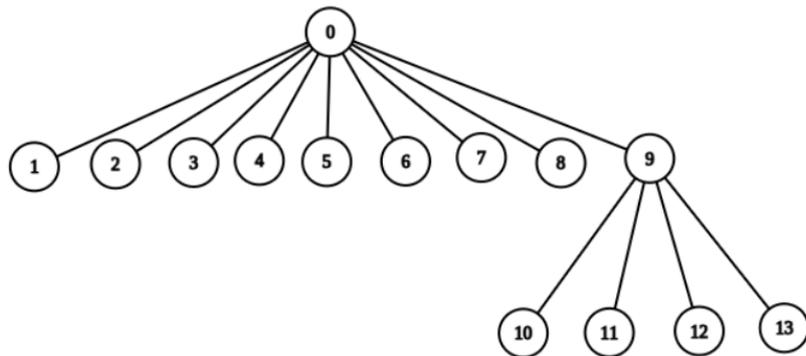


Figura 9. Árvore recursiva $T(3)$

Estes são os autovalores não negativos de para $T_2 \dots T_{11}$

- $T_2 : (0, 2)$

- $T_3 : (0, 1.8162, 3.1147)$
- $T_4 : (0, 1.8074, 2.9244, 4.145)$
- $T_5 : (0, 1.8073, 2.9113, 3.9526, 5.1609)$
- $T_6 : (0, 1.8073, 2.911, 3.9376, 4.9667, 6.1715)$
- $T_7 : (0, 1.8073, 2.911, 3.9372, 4.9504, 5.976, 7.1791)$
- $T_8 : (0, 1.8073, 2.911, 3.9372, 4.9499, 5.9588, 6.9827, 8.1848)$
- $T_9 : (0, 1.8073, 2.911, 3.9372, 4.9499, 5.9583, 6.9649, 7.9877, 9.1893)$
- $T_{10} : (0, 1.8073, 2.911, 3.9372, 4.9499, 5.9583, 6.9643, 7.9694, 8.9916, 10.1928)$
- $T_{11} : (0, 1.8073, 2.911, 3.9372, 4.9499, 5.9583, 6.9642, 7.9687, 8.9729, 9.9948, 11.196)$

Além disso, para todas as árvores T_2, \dots, T_{11} todo autovalor diferente de 0 está no suporte de todo vértice da árvore.

Vale ressaltar que autovalores do suporte de árvores corresponde a um tópico amplamente estudado, [Csikvari 2010] apresenta uma construção de árvores que possuem autovalores inteiros arbitrariamente espaçados.

A relação entre transferência perfeita de estado e o diâmetro de um grafo também é um problema que vem sendo estudado, [Coutinho 2018] apresenta uma demonstração alternativa para o teorema 3.4 e postula o problema de **encontrar uma construção de grafos que admitem PST e não possuam tamanho exponencial em função da distância de seus vértices.**

3.3. Grafos que falham condição (c) de 3.1

Aqui não iremos abordar profundamente esses grafos, uma vez que exemplos que satisfaçam as condições (a) e (b), mas falham na (c) não são tão conhecidos. Porém, apresentamos um exemplo no qual isso acontece.

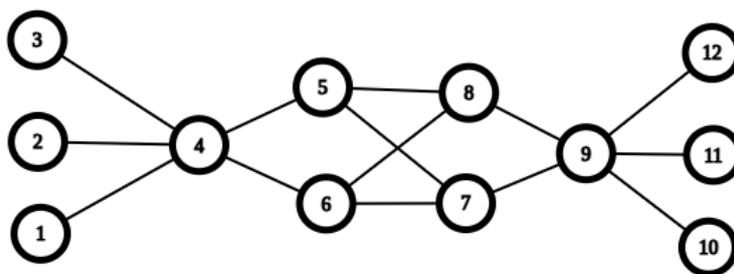


Figura 10. Não existe PST entre vértices 4 e 9, apesar de satisfazerem condições (a) e (b).

4. Autovalores dentro de um intervalo

Com o intuito de abordar nosso problema iremos nos focar na condição (b) do teorema 3.1, para isso precisamos de uma ferramenta que nos permite realizar afirmações a respeito dos autovalores no suporte do nosso grafo.

Para isso, utilizaremos uma variação do algoritmo de [Jacobs and Trevisan 2011]. Esse algoritmo corresponde a um método $\mathcal{O}(n)$ que computa, para qualquer árvore T e um intervalo (α, β) , quantos autovalores de T estão nesse intervalo.

Seja T uma árvore enraizada em um vértice r . Dado um valor α computamos um valor $d(v, \alpha)$ para todo vértice $v \in V(T)$ da seguinte forma:

$$d(v, \alpha) = \alpha - \sum_{c \text{ filho de } v} \frac{1}{d(c, \alpha)}$$

A partir dessa definição, é possível demonstrar que [Jacobs and Trevisan 2011]:

Teorema 4.1. *O número de vértices em T com $d(v, \alpha) > 0$ é igual ao número de autovalores de T no intervalo $(-\infty, \alpha)$.*

Corolário 4.1. *O número de autovalores no intervalo (α_1, α_2) é o número de entradas positivas de $d(v, \alpha_2)$ menos o número de entradas positivas de $d(v, \alpha_1)$.*

Podemos também observar algumas propriedades que $d(v, \alpha)$ satisfaz como função e ter uma intuição sobre seu comportamento:

- Se $d(v, \alpha) = 0$, $d(c, \alpha) \neq 0$ para todo filho c de v .
- O valor $d(v, \alpha)$ cresce a medida que α cresce, a menos quando $d(c, \alpha) = 0$ para algum filho c de v .
- Os valores $d(v, \alpha)$ alternam ciclicamente entre os intervalos $(-\infty, 0)$, $[0, 0]$, $(0, \infty)$.

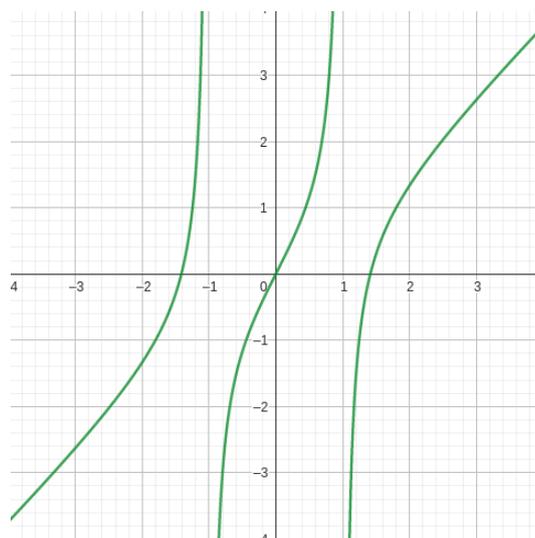


Figura 11. Comportamento da função $d(v, \alpha)$ para P_3 enraizado em uma das pontas.

Gostaríamos de utilizar o algoritmo para descobrir autovalores próximo em nosso grafo, perceba porém, que nas condições de transferência perfeita de estado os autovalores precisam pertencer ao suporte do vértice. Portanto, precisamos de algumas observações adicionais.

Teorema 4.2. *Seja T uma árvore enraizada, seja T_v a subárvore de T com raiz v e seja $\phi(X, \alpha)$ o polinômio característico do grafo X , isto é, $\phi(X, \alpha) = \det(\alpha I - A)$, então:*

$$d(v, \alpha) = \frac{\phi(T_v, \alpha)}{\phi(T_v \setminus v, \alpha)}$$

Demonstração. Para a demonstração iremos utilizar a fórmula de Leibniz para computar o determinante de matrizes.

$$\det(A) = \begin{vmatrix} a_{1,1} & \dots & a_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & \dots & a_{n,n} \end{vmatrix} = \sum_{\pi \in S_n} (\text{sgn}(\pi) \prod_i^n a_{i,\pi_i})$$

Em que $\text{sgn}(\pi)$ representa o sinal da permutação, este valor vale 1 se a permutação é formada por uma quantidade par de ciclos pares e -1 se ela é formada por uma quantidade ímpar desses ciclos.

A ideia desse modo de computar determinantes é parear, de todas as formas possíveis, linhas com colunas da matriz e computar a soma dos produtos das entradas desses pareamentos. A vantagem de utilizar esse método de calcular determinante, no lugar da forma por cofatores é que podemos decompor os termos da soma em função de elementos do grafo. Sendo assim, ao iniciar na primeira linha da matriz e seguir π_i até retornar a essa primeira posição, podemos separar os termos do somatório em três partes, quando o ciclo de π que contém o vértice 1 é unitário, quando o ciclo possui dois elementos e quando o ciclo possui mais elementos. Separando o somatório nesses três termos, podemos então considerar determinantes menores. As separações estão apresentadas na figura 4.

$$\begin{pmatrix} \alpha & -1 & -1 \\ -1 & \alpha & -1 \\ -1 & -1 & \alpha \end{pmatrix}$$

Figura 12. Vértice.

$$\begin{pmatrix} \alpha & -1 & -1 \\ -1 & \alpha & -1 \\ -1 & -1 & \alpha \end{pmatrix}$$

Figura 13. Aresta.

$$\begin{pmatrix} \alpha & -1 & -1 \\ -1 & \alpha & -1 \\ -1 & -1 & \alpha \end{pmatrix}$$

Figura 14. Ciclo.

Assim, escrevemos o determinante de forma explicita,

$$\det(\alpha I - A(T)) = \alpha \det(\alpha I - A(T \setminus r)) + \sum_{c \text{ filho}} (-1) \det(\alpha I - A(T \setminus r, c)) + 0$$

Em que o primeiro termo do lado direito vêm ao considerarmos pareamentos de vértice, o segundo de aresta e o terceiro de ciclo, perceba que quando o pareamento é de aresta o sinal se torna -1 , uma vez que temos um ciclo par a mais que a permutação removendo vértices r e c , além disso, quando o pareamento é de ciclo o resultado é 0, uma vez que não temos ciclos na árvore.

Manipulando a expressão,

$$\phi(T) = \alpha \phi(T \setminus r) - \sum_{c \text{ child}} \phi(T \setminus r, c)$$

$$\frac{\phi(T)}{\phi(T \setminus r)} = \alpha - \sum_{c \text{ child}} \frac{\phi(T \setminus r, c)}{\phi(T \setminus r)}$$

Como $d(v, \alpha) = \alpha = \phi(T, \alpha)/\phi(T \setminus r, \alpha)$ quando v é uma folha e ambos seguem a mesma relação de recorrência, temos nosso resultado. □

Corolário 4.2. λ é autovalor de T no suporte da raiz r se e somente se $d(r, \lambda) = 0$.

5. Upper Bound no Tamanho do Caminho

Nosso objetivo nessa seção é encontrar um valor k tal que se $m \geq k$, vértices a e b da figura 1 não admitem transferência perfeita de estado.

Lema 5.1. *Seja T uma árvore enraizada no vértice b , todos os sinais positivos de $d(v, \alpha)$ no caminho de a até b advém de raízes distintas no suporte de b no intervalo $(-\infty, \alpha)$.*

Demonstração. Se $d(v, \alpha) > 0$, então o sinal do pai de v precisa ter transicionado de um valor negativo para um valor positivo. Portanto, o sinal da raiz precisa ter transicionado pelo menos o número de valores positivos no caminho de a até b . □

Teorema 5.1. *Sejam a e b vértices de uma árvore conectados por um caminho simples de tamanho m . Não existe PST de a para b se $m \geq 8$.*

Demonstração. O resultado segue contando o número de sinais positivos no caminho de a até b na árvore para distintos valores de α . Aqui, assumimos que os valores de $d(a, \alpha)$ e $d(b, \alpha)$ podem ser valores quaisquer.

$\alpha = 0$. Nesse caso, $d(v, 0) = -\frac{1}{d(c,0)}$ ao longo do caminho, esse valor alterna de positivo para negativo do vértice filho para pai. Portanto, o número de valores positivos de $d(v, 0)$ no caminho de a até b é **no máximo** $\lceil \frac{m-1}{2} \rceil + 1$ e **no mínimo** $\lfloor \frac{m-1}{2} \rfloor$.

$\alpha = 2$. Nesse caso, $d(v, \alpha) = 2 - \frac{1}{d(l,\alpha)}$, uma vez que tiver algum valor negativo no caminho, todos os demais valores se tornam positivos. Portanto, o número de valores positivos é **pelo menos** $m - 2$.

$\alpha = -2$. Nesse caso, $d(v, \alpha) = -2 - \frac{1}{d(l,\alpha)}$, uma vez que exista um valor positivo no caminho, todos os demais valores se tornam negativos. Portanto, o número de valores positivos é **no máximo** 2.

m	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\alpha = 0$ (min)	0	1	1	2	2	3	3	4	4
$\alpha = 0$ (max)	2	2	3	3	4	4	5	5	6
$\alpha = 2$ (min)	0	1	2	3	4	5	6	7	8
$\alpha = -2$ (max)	2	2	2	2	2	2	2	2	2

Figura 15. Número de sinais positivos no caminho de a até b para diferentes valores de m .

Ao comparar $\alpha = -2$ e $\alpha = 2$ para $m \geq 8$. A diferença no número de sinais positivos no caminho implica que precisamos de pelo menos quatro novos autovalores no intervalo $(-2, 2)$. Porém, a existência de um autovalor diferente de 0 no intervalo $(-1, 1)$ exclui a possibilidade de PST para árvores. Portanto, a única forma de ter autovalores suficientemente espaçados seria tendo um em cada intervalo $(-2, 1)$, $[0, 0]$ e $[1, 2)$. □

Corolário 5.1. *Se uma árvore possui autovalores inteiros, então não existem vértices conectados por um caminho simples a distância maior ou igual que 8.*

6. Lower Bound no Tamanho do Caminho

Como mencionado anteriormente, em [Coutinho et al. 2022] é demonstrado que não existe transferência perfeita de estado quando os vértice a e b estão conectados por uma ponte ou por um caminho de tamanho 3, portanto, resta demonstrar para para casos em que os caminhos possuem comprimento 4, 5, 6 e 7, estes casos serão demonstrados individualmente:

Teorema 6.1. *Sejam a e b vértices de uma árvore conectados por um caminho subdividido de tamanho m . Não existe transferência de estado entre a e b se $m = 4$.*

Demonstração. Segue de [Coutinho et al. 2022] que $\phi(G)$ pode ser decomposto como $\phi(G) = \phi(G^+)\phi(G^-)$ em que G^+ e G^- são representados na figura 6,

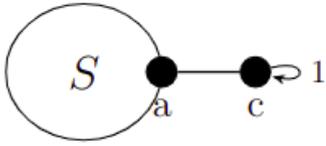


Figura 16. G^+ .

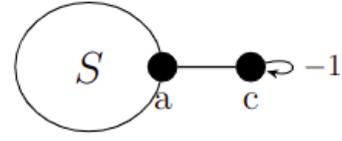


Figura 17. G^- .

Devido a essa decomposição, o espectro de G é a união do espectro de G^+ e G^- , em particular, os autovalores positivos e negativos no suporte de a são, respectivamente, todos os autovalores de a no suporte de G^+ e todos os autovalores de a no suporte de G^- .

Agora, utilizamos nosso algoritmo para calcular $d(a, \alpha)$ em ambos os grafos:

$$d_{G^+}(a, \alpha) = d_S(a, \alpha) - \frac{1}{\alpha - 1}$$

$$d_{G^-}(a, \alpha) = d_S(a, \alpha) - \frac{1}{\alpha + 1}$$

Como $d_{G^+}(a, \alpha) - d_{G^-}(a, \alpha) = -2/(\alpha^2 - 1)$, os valores nunca são iguais em valores finitos, $d_{G^+}(a, \alpha) < d_{G^-}(a, \alpha)$ nos intervalos $\{(-\infty, -1), (1, \infty)\}$ e $d_{G^+}(a, \alpha) > d_{G^-}(a, \alpha)$ em $(-1, 1)$. O que implica que existe um polo em $\alpha = -1$ e outro polo em $\alpha = 1$.

Ao mesmo tempo, $d_S(a, \alpha)$ possui um polo no intervalo $(-1, 1)$, uma vez que $d_S(a, \alpha) = \phi(S)/\phi(S \setminus a)$ e toda árvore, com exceção de P_2 possui um autovalor nesse intervalo.

Portanto, $d_{G^+}(a, \alpha)$ ou $d_{G^-}(a, \alpha)$ possuem uma raiz diferente de 0 no intervalo $(-1, 1)$, o que bloqueia transferência de estado pela condição (b) 3.1. □

Teorema 6.2. *Sejam a e b vértices de uma árvore conectados por um caminho subdividido de tamanho m . Não existe transferência de estado entre a e b se $m = 5$.*

Demonstração. Segue de [Coutinho et al. 2022] que $\phi(G)$ pode ser decomposto como $\phi(G) = \phi(S)\phi(Z)$ em que Z e S são os grafos da figura 6.

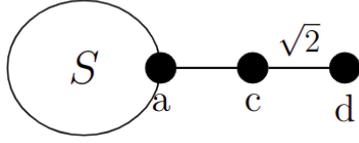


Figura 18. G^+ .

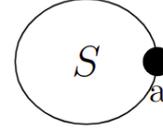


Figura 19. G^- .

Os autovalores dos suportes positivos e negativos de a são, respectivamente, todos os autovalores no suporte de a em Z e todos os autovalores no suporte de a em S . É importante notar que:

$$d_Z(a, \alpha) = d_S(a, \alpha) - \frac{\alpha}{\alpha^2 - 2}$$

Nesse caso, temos dois polos em Z em $\alpha = -\sqrt{2}$ e $\alpha = \sqrt{2}$. Além disso, existe um polo de $d_S(a, \alpha)$ no intervalo $[-1, 1]$. Portanto, temos pelo menos dois autovalores no suporte positivo de a que pertence ao intervalo $(-\sqrt{2}, \sqrt{2})$.

Como os dois autovalores pertencem ao suporte negativo, pela condição (c) de 3.1 eles precisam estar espaçados de pelo menos $2\sqrt{\Delta}$. Logo, eles devem ser -1 e 1 . Mas calculando $d_Z(a, 1) - d_S(a, 1)$, descobrimos que $d_S(a, 1) = -1$. Como a derivada de $d_S(a, 1)$ é maior que 1 [Spier 2022], temos dois autovalores a distância menor que 1.

□

A demonstração para $m = 7$ ocorre de forma similar à de $m = 5$ e é deixada como exercício ao leitor.

Teorema 6.3. *Sejam a e b vértices de uma árvore conectados por um caminho subdividido de tamanho m . Não existe transferência de estado entre a e b se $m = 6$.*

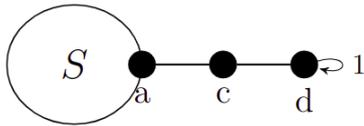


Figura 20. G^+ .

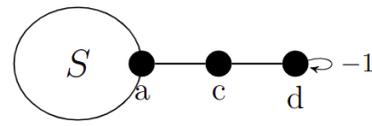


Figura 21. G^- .

Demonstração. Utilizamos as seguintes desigualdades

$$d_{G^+}(a, \alpha) = d_S(a, \alpha) - 1/(\alpha - (1/(\alpha - 1)))$$

$$d_{G^-}(a, \alpha) = d_S(a, \alpha) - 1/(\alpha - (1/(\alpha + 1)))$$

$$d_{G^+}(a, \alpha) - d_{G^-}(a, \alpha) = -2/(1 - 3x^2 + x^4)$$

$d_{G^+}(a, \alpha)$ possui um polo em $(1 - \sqrt{5})/2$ e $d_{G^-}(a, \alpha)$ possui um polo em $(\sqrt{5} - 1)/2$. Se $d_S(a, \alpha)$ possui um polo no intervalo $(-1, 1)$ diferente dos polos acima, então

temos um autovalor no suporte de a que impede transferência de estado. Por outro lado, 0 deve ser um autovalor de a ou no suporte positivo ou no negativo.

Se observarmos as diferenças entre $d_{G^+}(a, \alpha)$ e $d_{G^-}(a, \alpha)$, verificamos que, se nenhum deles é igual a 0, então o outro deve ser ou 2 ou -2. Mas como as derivadas são maiores que 2 (soma de duas funções com derivada maior que 1 no intervalo), então os dois autovalores devem estar a distância menor que 1.

□

7. Conclusão e Trabalhos Futuros

Por fim, concluímos que árvores subdivididas não admitem transferência perfeita de estado. Além disso, apresentamos a demonstração de uma variedade de teoremas da teoria da informação quântica, explorando em detalhes o espectro de árvores e os teoremas de transferência perfeita de estado.

Apesar de utilizarmos em vários momentos o fato de nosso grafo ser uma árvore, os teoremas apresentados nesse projeto podem ser generalizados para grafos gerais, nesse caso a pergunta seria se existe transferência perfeita de estado através de pontes subdivididas, um resultado que generaliza [Coutinho et al. 2022].

Outra abordagem para trabalhos futuros seria considerar, ao invés de um caminho simples conectando os vértices a e b , considerar estruturas conectadas a cada vértice, por exemplo, se ao longo do caminho fossem adicionados ramos de árvores de forma simétrica, ou seja, o vértice i possuindo a mesma árvore que o vértice $m - i$.

Por fim, uma tentativa mais ousada seria demonstrar a conjectura de [Coutinho and Liu 2015], provando que não existe transferência perfeita de estado em árvores diferentes de P_2 e P_3 .

Referências

- [Brouwer and Haemers 2012] Brouwer, A. E. and Haemers, W. H. (2012). *Spectra of Graphs*. Universitext. Springer, New York.
- [Casaccino et al. 2009] Casaccino, A., Lloyd, S., Mancini, S., and Severini, S. (2009). Quantum state transfer through a qubit network with energy shifts and fluctuations. *International Journal of Quantum Information*, 7:1417–1427.
- [Childs et al. 2003] Childs, A. M., Cleve, R., Deotto, E., Farhi, E., Gutmann, S., and Spielman, D. A. (2003). Exponential algorithmic speedup by a quantum walk. In ., STOC '03, page 59–68, New York, NY, USA. Association for Computing Machinery.
- [Christandl et al. 2005] Christandl, M., Datta, N., Dorlas, T. C., Ekert, A., Kay, A., and Landahl, A. J. (2005). Perfect transfer of arbitrary states in quantum spin networks. *Physical Review A*, 71(3):32312.
- [Coutinho 2014] Coutinho, G. (2014). *Quantum State Transfer in Graphs*. PhD dissertation, University of Waterloo.
- [Coutinho 2018] Coutinho, G. (2018). Quantum walks and the size of the graph. *Discrete Mathematics*, 342.
- [Coutinho et al. 2022] Coutinho, G., Godsil, C., Juliano, E., and van Bommel, C. M. (2022). Quantum walks do not like bridges. *Linear Algebra and its Applications*, 652:155–172.
- [Coutinho and Liu 2015] Coutinho, G. and Liu, H. (2015). No Laplacian Perfect State Transfer in Trees. *SIAM Journal on Discrete Mathematics*, 29(4):2179–2188.
- [Csikvari 2010] Csikvari, P. (2010). Integral trees of arbitrarily large diameters. *Journal of Algebraic Combinatorics*, 32:371–377.
- [Gabriel Coutinho 2020] Gabriel Coutinho, C. G. (2020). *Graph Spectra and Continuous Quantum Walks*. Unpublished.
- [Godsil 2012] Godsil, C. D. (2012). When can perfect state transfer occur? *Electronic Journal of Linear Algebra*, 23:877–890.
- [Gross and Yellen 2006] Gross, J. T. and Yellen, J. (2006). *Graph Theory and Its Applications, 2nd ed.*, volume 293. Boca Raton.
- [Jacobs and Trevisan 2011] Jacobs, D. P. and Trevisan, V. (2011). Locating the eigenvalues of trees. *Linear Algebra and its Applications*, 434(1):81–88.
- [Kay 2018] Kay, A. (2018). The perfect state transfer graph limbo. *arXiv preprint arXiv:1808.00696*.
- [Kempton et al. 2017] Kempton, M., Lippner, G., and Yau, S.-T. (2017). Perfect state transfer on graphs with a potential. *Quantum Information & Computation*, 17:303–327.
- [Spier 2022] Spier (2022). Strong cospectrality in trees. *arXiv preprint arXiv:2206.02995*.