

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ANDRÉ TANUS CESÁRIO DE SOUZA

Medida de complexidade estatística quântica

BELO HORIZONTE
2022

André Tanus Cesário de Souza

Medida de complexidade estatística quântica

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Reinaldo Oliveira Vianna

Belo Horizonte

2022

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

S722m Souza, André Tanus Cesário.
Medida de Complexidade Estatística Quântica / André Tanus Cesário Souza.
– 2022.
118 f. : il.

Orientador: Reinaldo Oliveira Vianna.
Tese (doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais
Departamento de Física.
Bibliografia: f. 107-120.

1. Teoria da Informação Quântica. 2. Teoria da Informação Clássica.
3. Mecânica Quântica. 4. Mecânica Estatística. I.Título. II. Vianna, Reinaldo
Oliveira. III. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 531.19 (043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

FOLHA DE APROVAÇÃO

A presente tese, intitulada "**Medida de Complexidade Estatística Quântica**" de autoria de **ANDRÉ TANUS CESÁRIO DE SOUZA** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **DOUTOR EM CIÊNCIAS**, em nove de dezembro de 2022.

Belo Horizonte, 09 de dezembro de 2022.

Prof. Reinaldo Oliveira Vianna
Orientador do estudante
Departamento de Física/UFMG

Prof. José Geraldo Peixoto de Faria
CEFET/MG

Prof. Leonardo Teixeira Neves
Departamento de Física/UFMG

Prof. Raimundo Silva Junior
Departamento de Física/UFRN

Prof. Lucas Alvares da Silva Mól
Departamento de Física/UFMG

Candidato: André Tanus Cesário de Souza



Documento assinado eletronicamente por **Lucas Alvares da Silva Mol, Professor do Magistério Superior**, em 13/12/2022, às 10:24, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Leonardo Teixeira Neves, Professor do Magistério Superior**, em 13/12/2022, às 10:45, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **José Geraldo Peixoto de Faria, Usuário Externo**, em 13/12/2022, às 11:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Reinaldo Oliveira Vianna, Professor do Magistério Superior**, em 13/12/2022, às 11:42, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Raimundo Silva Júnior, Usuário Externo**, em 13/12/2022, às 12:48, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1957264** e o código CRC **18159DB8**.

Dedicatória

À Roane Tanus Cesário de Souza, minha amada mãe (in memoriam).

À minha amada família, Ida Bustos Rodríguez e Thiago T. Bustos.

Ao Eduardo Cesário de Souza, meu querido pai.

Aos meus quatro queridos avós (in memoriam).

*À minha querida profa. Maria Carolina Nemes,
uma das forças da natureza (in memoriam).*

Agradecimentos

Agradeço o apoio sempre constante do meu orientador e amigo, o prof. Reinaldo O. Vianna, pelas muitas discussões sobre o que há de mais bonito e fundamental na Mecânica Quântica. Agradeço também ao grande professor e físico, meu mestre e amigo Mário Mazzoni, o seu apoio, exemplo e carinho sempre foram um dos pilares da minha vida acadêmica e pessoal. Agradeço também aos grandes físicos, o prof. C. H. Monken e o prof. Sebastião de Pádua, além do grande professor e amigo Leonardo Neves.

Agradeço aos meus amados familiares: ao meu Pai, à Cátia, à minha irmã Raquel, minha irmã bebê Marina, meu querido irmão Gustavo e querida cunhada Gabrielle Francinne, minha amada afilhada Helena e minha sobrinha Mariana. Muchas gracias a mi familia peruana: Anina, mis lindas sobrinas y ahijadas Rafaella Catalina y mi linda sobrina Adriana, Deivy, Lita, Hobher, Betty, sr. Adrián y sra. Gaudea. Agradeço ao meu tio Libério que, apesar de não termos contato hoje em dia, grande parte do meu desejo de aprender física descende daquelas nossas conversas (juntamente com o meu pai) sobre o universo quando eu era criança. E outros agradecimentos especiais aos amores da minha vida: Ida Bustos Rodríguez e Thiago Tanus Bustos, pela imensa compreensão, amor e carinho. Vocês são a luz que ilumina o meu universo.

Agradeço também à minha melhor amiga Paula Paganini, pelo grande apoio e ajuda em todos os momentos e subespaços da minha vida, você nos ajudou infinitamente, justamente quando a minha família mais precisou. Um agradecimento especial aos meus amigos e ex-chefes, o grande prof. e engenheiro Rodrigo de Oliveira Matos, minha ex-chefe, a querida profa. Rosana Franco e a querida profa. Rose Mary Rosa de Lima e, também, a minha ex-chefe e querida profa. Carolina Valente de Oliveira, muito obrigado por todo apoio, toda ajuda, amizade e companheirismo. Nos tempos mais difíceis, que reconhecemos os melhores líderes e os maiores companheiros. Também não posso deixar de mencionar meus amigos do coração e da física, o prof. Adir Garcia Reis e a profa. Flávia Vieira Braga.

Um abraço especial para meus grandes amigos, o prof. Alexandre Sauer (muito obrigado pela amizade e companheirismo), para o prof. Miki (pelas ótimas conversas), minha grande amiga profa. Francisca Jaquelma, o prof. Arthur Cremonesi (sempre acompanho suas palavras de carinho em seus *status* de *WhatsApp*), o grande amigo e excelente professor, o prof. Felipe Heitmann, os grandes amigos e engenheiros: o prof. Júlio César Pacheco (muito obrigado por todos os ensinamentos) e o prof. Helbert Esterlando.

Um abraço para meu grande amigo, o prof. Júlio Cesar da Silva e, também, para todos os meus colegas de Faculdade Pitágoras/Anhanguera, especialmente para a minha querida chefe profa. Amanda Petronilha (sempre muito carinhosa e compreensiva comigo).

Agradeço muito ao meu melhor amigo e parceiro Tassius Temistocles e, também, à minha grande e querida amiga Ana Paula Alves. Um agradecimento muito especial para as nossas duas famílias amigas: a família da Isabela Araújo Avelar (Cícero e Bernardo Araújo Avelar) e a família da Marília Koscky (Breno e Pedro Koscky).

Um agradecimento especial aos meus grandes amigos do grupo *InfoQuant*: meu primeiro e especial agradecimento ao meu grande amigo Diego L. B. Ferreira, sem a sua enorme ajuda, sem o seu apoio e amizade, o nosso artigo na revista *Entropy* e esta tese jamais teriam sido terminados! Agradeço ao meu grande amigo e parceiro da vida, do *rock* e da física, o grande físico Tiago Debarba, agradeço ao meu grande amigo Fernando Iemini (um excelente músico e parceiro, além de ser um grande físico), além do meu amigo Thiago O. Maciel. Um grande abraço ao meu amigo e grande físico Leonardo da Silva Souza, que gentilmente aceitou ser um dos profs. suplentes da minha banca de doutorado.

Também agradeço ao grupo *Enlight* pela enorme colaboração durante todo este tempo. Agradeço aos outros amigos do *Enlight*: especialmente ao prof. Pablo Saldanha e ao prof. Raphael Drummond (muito obrigado pela disponibilidade de ter aceitado o convite como um dos profs. suplentes da minha banca de doutorado). Um agradecimento muito especial ao grande prof. Cláudio Campos pela sua incansável luta pela divulgação científica, pelo ensino de história e filosofia. A sua luta pela verdade, pela educação e contra a pseudo-ciência é fundamental nesta era da “pós-verdade”. Muito obrigado pelo seu apoio, principalmente quando eu pensei em desistir.

Agradeço também aos amigos, todos os funcionários(as) da UFMG e todos os meus colegas do Depto. de Física da UFMG, meu amigo José Roberto Júnior, meus amigos Lígia Parreira e Mangos, meu amigo Néstor Cifuentes, além dos meus dois grandes amigos, Bolivar e o Capitão Clyffe. Um agradecimento a todos meus alunos e ex-alunos: em especial um abraço para meu querido ex-aluno Vinícius Madeira, um agradecimento aos meus queridos ex-alunos que nunca deixaram de acompanhar a minha trajetória: Luiz F. Evaristo de Paiva, Renie Andrade de Oliveira, Tiago Ribeiro Abreu, Fernando Celente de Paiva, Filipe R. Brilhante, Letícia Pessoti, Andreza Nunes, Flávio de O. Gebauer, Alexssander Tecchio e Rafael Licério, além de tantos outros que seria uma tarefa impossível enumerá-los todos. Um outro agradecimento para grande promessa da física UFMG, Nicolas Reinaldet¹.

Agradeço ao Partido dos Trabalhadores e, também, ao presidente Luiz Inácio Lula da Silva pelos governos anteriores, e por nos ter salvado de mais um governo horrendo do bozo.

—Este trabalho² teve o apoio financeiro direto e indireto do **CNPq**, da **CAPES** e da **FAPEMIG**.

¹Um querido “ex-aluno” que colaborou cientificamente comigo, justamente na minha fase em que eu estive mais desanimado com a ciência e com a pesquisa.

²Este trabalho foi produzido em L^AT_EX, classe abnT_EX2, por meio do *template* fornecido pelo Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Minas Gerais–UFMG.

Epígrafe

*“Sob os ventos da redemocratização, dizíamos: ditadura nunca mais!
Hoje, depois do terrível desafio que superamos, devemos dizer:
democracia para sempre!” (...)*

*Luiz Inácio Lula da Silva,
39º Presidente da República Federativa do Brasil.*

Resumo

As medidas de complexidade estatística são ferramentas singulares que podem ser utilizadas com o objetivo de detectar fenômenos físicos relevantes. Muitos desses fenômenos ocorrem de tal modo que deixam assinaturas que podem ser interpretadas como mudanças do estado do sistema e que poderiam ser lidas, por meio dessas medidas, como complexidade estatística, mensurada em uma escala de ordem e desordem. Estudamos a medida de complexidade estatística definida por López-Ruiz *et al.*, denominamo-la de medida de complexidade estatística clássica, *i.e.*, “*classical statistical complexity measure*” (CSCM), e a aplicamos em um modelo simples de evolução temporal discreta caracterizada pelas cadeias de Markov finitas, em dimensão 2, para evoluções estocásticas e bi-estocásticas. Introduzimos uma versão quântica para essa medida de complexidade estatística, denominada de medida de complexidade estatística quântica, ou seja, “*quantum statistical complexity measure*” (QSCM), no contexto da teoria da informação quântica, e a usamos como função sinalizadora de transições de correlações quânticas, medidas em uma escala de ordem e desordem. Discutimos a possibilidade de tais transições caracterizarem fenômenos físicos interessantes, tais como transições de fase quânticas ou variações abruptas nas distribuições de correlação. Aplicamos nossa medida em dois modelos hamiltonianos solúveis analiticamente: o modelo de Ising quântico-1D, no estado reduzido de partícula única, e na cadeia de Heisenberg XXZ de *spin*-1/2, no estado reduzido de duas partículas. Analisamos o comportamento da medida em transições de fase quânticas para tamanhos de sistemas finitos, bem como no limite termodinâmico por meio da técnica do ansatz de Bethe. Concluimos que a medida de complexidade estatística quântica pode desempenhar um papel de função sinalizadora de transições de correlações, além de também discernir transições de fase quânticas, devido ao fato do caráter de mudança abrupta que várias quantidades físicas experimentam nesses pontos de transição, além da maneira pela qual os estados reduzidos desses sistemas críticos transitam nessa escala de ordem e desordem.

Palavras-chave: complexidade; medida de complexidade LMC; medida de complexidade estatística; cadeias de Markov; medida de complexidade estatística quântica; transições de fase quânticas; modelo de Ising quântico 1D; modelo de Heisenberg XXZ de *spin*-1/2.

Abstract

Statistical complexity measures are distinctive tools that can detect significant physical phenomena. Many of these phenomena occur in such a way that they leave signatures that can be interpreted as changes in the state of the system, which can be read as statistical complexity through these measures, measured on a scale of order and disorder. We investigate the classical statistical complexity measure (CSCM) defined by López-Ruiz *et al.* and apply it to a simple model of discrete time evolution, characterized by finite Markov chains in dimension 2, for stochastic and bistochastic evolutions. Additionally, we introduce a quantum version for measuring statistical complexity: the quantum statistical complexity measure (QSCM), in the context of quantum information theory, and use it as a signaling function for quantum correlation transitions, measured on a scale of order and disorder. We consider the possibility that such transitions characterize intriguing physical phenomena, such as quantum phase transitions or sudden variations in correlation distributions. Our measure is applied to two analytically solvable Hamiltonian models: the one-dimensional quantum Ising model in the reduced single-particle state, and the Heisenberg chain XXZ of spin-1/2 in the state reduced by two particles. We analyze the measurement behavior in quantum phase transitions for finite system sizes and in the thermodynamic limit using the Bethe ansatz technique. We conclude that the quantum statistical complexity measure can serve as a signaling function of correlation transitions and distinguish quantum phase transitions, due to the abruptness that physical quantities experience at these transition points and the way in which the reduced states of these critical systems change within a scale of order and disorder.

Keywords: complexity; LMC complexity measure; statistical complexity measure; Markov chains; quantum statistical complexity measure; quantum phase transitions; 1D-quantum Ising model; Heisenberg XXZ spin-1/2.

Lista de Abreviaturas e Siglas

CAS sistemas complexos adaptativos

CPS sistemas físicos complexos

CSCM medida de complexidade estatística clássica

DMRG *density matrix renormalization group*

LMC López-Ruiz, Mancini e Calbet

QSCM medida de complexidade estatística quântica

RG grupo de renormalização

SDL medida de complexidade de Shiner, Davison e Landsberg

TFQ transição de fase quântica

Lista de Figuras

- Figura 1 – Medida de complexidade estatística clássica para uma cadeia de Markov estocástica $\mathcal{C}(\vec{p}_{(m)})$, (CSCM), em azul; entropia de Shannon $H(\vec{p}_{(m)})$, em vermelho; $D(\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi})$, em amarelo, para uma matriz S com $a = 0.16$ e $b = 0.01$, em função dos tempos discretos $1 \leq m \leq 25$. O tempo de mistura está dentro do intervalo $0 \leq t_{mix} \leq 7$, para $\varepsilon = \frac{1}{100}$, com $t_{mix}^{max} = 7$, reta vertical traço-ponto. A reta horizontal pontilhada indica: $H(\vec{\pi}) = 0.2237$ 46
- Figura 2 – Representação dos vetores $\vec{p}_{(m)} = S^m \vec{p}_0$, para os tempos discretos $1 \leq m \leq 25$, com vetor inicial $\vec{p}_0 = (1, 0)^T$, em função de $a(k)$, com $k = 1, \dots, 24$, para uma cadeia de Markov com matrizes estocásticas definidas por $a = [0.04, 0.5]$, com $\Delta a = 0.02$ e $b = 0.01$. As normas l_2 dos vetores $\|\vec{p}_{(m)}\|_2$ estão ilustradas na barra de cores. 47
- Figura 3 – Medida de complexidade estatística clássica para uma cadeia de Markov biestocástica $\mathcal{C}(\vec{p}_{(m)})$, (CSCM), em azul; entropia de Shannon $H(\vec{p}_{(m)})$, em vermelho; $D(\vec{p}_{(m)} - \vec{\mathcal{I}})$, em amarelo, para uma matriz B com $a = 0.05$, em função dos tempos discretos $1 \leq m \leq 30$. O tempo de mistura está dentro do intervalo $1 \leq t_{mix} \leq 7$, para $\varepsilon = \frac{1}{100}$, com $t_{mix}^{max} = 7$ (reta vertical traço-ponto). A reta horizontal pontilhada indica $H(\vec{\mathcal{I}}) = \log(2) \approx 0.693$ 50
- Figura 4 – Representação dos vetores $\vec{p}_{(m)} = B^m \vec{p}_0$, para os tempos discretos $1 \leq m \leq 19$, com vetor inicial $\vec{p}_0 = (1, 0)^T$, em função de $a(k)$, para $k = 1, \dots, 19$, para uma cadeia de Markov com matrizes biestocásticas definidas por $a = [0.02, 0.2]$, com $\Delta a = 0.01$. As normas l_2 dos vetores $\|\vec{p}_{(m)}\|_2$ estão ilustradas na barra de cores. 51
- Figura 5 – Medida de complexidade estatística quântica (QSCM) para o estado $|GHZ\rangle$ reduzido de um *qubit*: $\mathcal{C}(\rho_{GHZ}^{12})$, para $0.01 < |a| \leq 1$. A reta vertical traço-ponto corresponde ao valor $|a| = \sin(\pi/6)$. O valor $|a| = \frac{1}{\sqrt{2}}$ está representado pela reta vertical tracejada. A reta vertical contínua corresponde ao valor $|a| = \cos(\pi/6)$ 64
- Figura 6 – Mapa de contorno da medida de complexidade estatística quântica (QSCM) para o estado $|W\rangle$ reduzido de um *qubit*: $\mathcal{C}(\rho_W^{12})$, para $|e| = 0.05$, $|c| \in [0, 1]$, $|d| \in [0, 1]$, com $|c|^2 + |d|^2 + |e|^2 = 1$ 65
- Figura 7 – Derivada segunda da QSCM com respeito ao parâmetro de campo transversal g , para diferentes sistemas finitos: $N = 4, 6, 16, 1000$ e, também, para o limite termodinâmico (linha contínua $N \rightarrow \infty$), para $g \in [0, 2]$, ver [53]. 87

- Figura 8 – Medida de complexidade estatística quântica, QSCM, $\mathcal{C}(\rho_{i+1})$, em azul, entropia de von Neumann $S(\rho_{i+1})$, em laranja. A função de equilíbrio é dada pela distância do traço $D(\rho_{i+1}, \mathcal{I})$, (representada em amarelo). Todas as medidas foram calculadas para a matriz reduzida de dois *qubits* para os sítios i e $i + 1$, ρ_{i+1} , em função de Δ , para $\Delta \in [-1, 8]$, todas as três curvas foram plotadas no limite termodinâmico [53]. 90
- Figura 9 – Mapa de contorno das curvas de nível de $\mathcal{C}(\rho_{i+1})$, QSCM, em função das funções de correlação $\langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rangle$ e $\langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle$. A linha tracejada e inclinada representa a equação integral cuja solução é $\Delta = 2.178$. A curva traço-ponto demonstra a curva para $\Delta = -1$, onde existe um ponto de divergência. O caminho indicado dentro das curvas de nível mostra a variação da quantidade $\mathcal{C}(\rho_{i+1})$, dentro do espaço de matrizes positivas-semidefinidas, para $\Delta \in [-1, 8]$. Os pontos em destaque são: $\Delta = -1$, (∇); $\Delta = 0$, (\times); $\Delta = 1$, ($+$); $\Delta = 2.178$, (\square) e $\Delta = 8$, (Δ). A região ferromagnética (em vermelho) e a região paramagnética (em azul) também estão representadas neste caminho [53]. 91
- Figura 10 – Medida de complexidade estatística quântica, QSCM, $\mathcal{C}(\rho_{i+r})$ para a matriz densidade de dois *qubits* para os sítios i e $i + r$, para $r = 1$ (curva em azul), e para $r = 2$ (curva em laranja), ambas no limite termodinâmico, em função da magnitude do parâmetro de campo uniaxial Δ . A subfigura demonstra o comportamento assintótico para grandes Δ , para ambos os casos. $\mathcal{C}(\rho_{i+1})$ e $\mathcal{C}(\rho_{i+2}) \rightarrow 1/4$ quando $\Delta \rightarrow \infty$, ver [53]. 92

Sumário

1	INTRODUÇÃO	17
2	O SIGNIFICADO DE COMPLEXIDADE	20
2.1	Noção intuitiva de complexidade	20
2.2	Uma introdução à perspectiva histórica do estudo em complexidade	21
2.3	O conceito de complexidade	23
2.3.1	Emergência e transições de fase	26
2.3.2	Sistemas em equilíbrio não são complexos	27
2.3.3	Transições de fase quânticas e emaranhamento	28
2.4	A complexidade estatística	30
3	MEDIDA DE COMPLEXIDADE ESTATÍSTICA CLÁSSICA (CSCM)	32
3.1	Funções quantificadoras dos graus de ordem e de desordem	32
3.1.1	Grau de ordem	32
3.1.2	Grau de desordem	33
3.2	Como quantificar a complexidade estatística clássica	33
3.2.1	Medida de complexidade estatística clássica (CSCM)	34
3.3	Algumas propriedades e aplicações de algumas medidas de complexidade clássicas	36
3.3.1	CSCM para $N = 2$ por meio da norma l_2	36
3.3.2	CSCM para $N = 2$ por meio da norma l_1	36
3.3.3	CSCM para variáveis contínuas	36
3.3.3.a	CSCM para uma distribuição gaussiana	38
3.3.3.b	CSCM para uma distribuição exponencial	38
3.4	Evolução temporal discreta da CSCM para $N = 2$	39
3.4.1	Cadeias de Markov, mapas estocásticos e biestocásticos	39
3.4.2	CSCM para cadeias de Markov em dimensão $N = 2$	42
3.4.2.a	CSCM para cadeias de Markov estocásticas em dimensão $N = 2$	43
3.4.2.b	CSCM para cadeias de Markov biestocásticas em dimensão $N = 2$	48
3.5	Revisão de algumas famílias de medidas de complexidade	51
3.5.1	Medida de complexidade de Shiner–Davison–Landsberg	52
3.5.1.a	Aplicações para a CSCM definida por meio da complexidade SDL	52
3.5.2	Medida de complexidade baseada na distância de Wootters	52
3.5.2.a	Aplicações para a CSCM definida por meio da distância de Wootters	56
4	MEDIDA DE COMPLEXIDADE ESTATÍSTICA QUÂNTICA (QSCM)	57

4.1	Como quantificar a complexidade estatística quântica	57
4.1.1	Definição da medida de complexidade estatística quântica (QSCM)	57
4.1.2	Algumas propriedades importantes da QSCM	59
4.2	A QSCM para estados <i>multipartites</i> reduzidos	63
5	EXEMPLOS E APLICAÇÕES	67
5.1	QSCM de um <i>qubit</i> na base de Bloch	67
5.2	Modelo de Ising quântico $1D$	68
5.2.1	Introdução ao modelo de Ising quântico $1D$	68
5.2.2	A transformação de Jordan-Wigner	70
5.2.2.a	Subespaço de paridade par	73
5.2.2.a.1	Número par de sítios	73
5.2.2.a.2	Número ímpar de sítios	78
5.2.2.b	Subespaço de paridade ímpar	79
5.2.2.b.1	Número par de sítios	79
5.2.2.b.2	Número ímpar de sítios	79
5.3	Estado fundamental do modelo de Ising quântico $1D$ no espaço de Hilbert	80
5.4	Matriz densidade reduzida de um <i>qubit</i> na base de Bloch para o modelo de Ising quântico $1D$ no limite termodinâmico	82
5.5	Derivada segunda da QSCM para o modelo de Ising quântico $1D$.	86
5.6	QSCM para o modelo de Heisenberg XXZ de <i>spin</i>-$1/2$	87
6	CONCLUSÕES	94
	REFERÊNCIAS	97
	APÊNDICES	112
	APÊNDICE A – ALGUMAS DEMONSTRAÇÕES	113
A.1	Subaditividade entre muitas cópias	113
A.2	Estado estacionário para cadeias de Markov com matrizes de transição estocásticas e biestocásticas	114
	APÊNDICE B – FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO ENTRE PRIMEIROS E SEGUNDOS VIZINHOS	117

1 Introdução

Consideremos um processo físico, químico ou biológico tal qual, por exemplo, a variação da temperatura de uma determinada quantidade de água, uma mistura entre duas soluções diferentes ou a formação de alguma rede neural. É intuitivo acreditar que se pudermos classificar todas as configurações possíveis de tais sistemas, descritas por seus padrões de *ordem e desordem*, seria possível caracterizá-los e controlá-los. Por exemplo, durante o processo de mudança da temperatura da água, se conhecemos o padrão de ordem e desordem da sua estrutura molecular e todas as interações envolvidas no processo, seria possível caracterizar e controlar completamente suas transições de fase.

Na teoria da informação, a capacidade de identificar certos padrões de ordem e de desordem nas distribuições de probabilidade deveria nos permitir controlar a criação, armazenamento e a transmissão da informação. Desta forma, a caracterização e quantificação da complexidade, nessa escala de ordem e desordem, contida em sistemas físicos e em suas partes constituintes poderiam ser cruciais para a teoria da informação [1].

Um ponto de concordância na literatura sobre a teoria da complexidade é que não existe um consenso para uma definição formal e unificada para a complexidade. A intuição sugere que sistemas que podem ser descritos como “não-complexos” devam ser facilmente compreendidos: eles podem ser descritos concisamente por meio de poucos parâmetros ou variáveis, e seu conteúdo de informação pode ser definido como “baixo”. Existem maneiras consideráveis de se definirem medidas de complexidade de sistemas físicos. Dentre tais definições, podemos citar medidas baseadas em algoritmos de compressão de sequências de tamanho finito [2–4], medidas de Kolmogorov ou Chaitin baseadas no tamanho do menor algoritmo que pode reproduzir um determinado tipo de padrão [5, 6] e medidas referentes à teoria da informação clássica [7–13].

Recentemente, com o objetivo de apresentar uma tentativa de definição de uma medida de divergência dentro da teoria da informação geométrica, uma medida de divergência canônica foi apresentada para quantificar a complexidade de sistemas clássicos e quânticos. No domínio clássico, provou-se que esta divergência coincide com a divergência clássica de Kullback–Leibler e no domínio quântico ela se reduz à entropia relativa quântica [14, 15].

Visto que as medidas de complexidades estatísticas clássicas atribuem a “simplicidade” de uma distribuição de probabilidade à quantidade de recursos necessários para armazenar uma determinada quantidade de informação [16, 17], da mesma forma, no reino quântico, a complexidade de uma dada matriz densidade poder-se-ia ser traduzida como o recurso necessário para criar, operar ou medir o estado quântico de um sistema [18–20].

Por outro lado, poderíamos supor que a complexidade, na teoria da informação

quântica, desempenharia um papel importante na quantificação de transições de padrões de ordem e desordem, o que poderia indicar fenômenos físicos quânticos de interesse, tais como transições de correlações, até mesmo transições de fase quânticas.

Em relação à complexidade contida nos sistemas físicos, alguns dos modelos mais simples da Física são: uma certa quantidade de um gás com o comportamento de um gás ideal e um cristal perfeito. Em um modelo de gás ideal, o sistema pode ser encontrado com a mesma probabilidade em qualquer um dos microestados acessíveis, portanto, cada estado contribui igualmente para a mesma quantidade de informação. Por outro lado, em um cristal perfeito, as regras de simetria restringem os estados acessíveis do sistema a apenas um estado muito simétrico. Esses modelos simples são casos extremos de complexidade mínima, em uma escala de ordem e desordem estatística, portanto, deve existir¹ algum estado intermediário, nessa escala, que possua um valor de complexidade máxima [21].

O principal objetivo deste trabalho é apresentar uma versão quântica da medida de complexidade estatística clássica, baseada no significado físico da caracterização e quantificação de transições entre padrões de ordem e desordem estatística de sistemas quânticos. Como resultado dessa definição, iremos aplicar esta contrapartida quântica no estudo de transições de correlações e transições de fase quânticas. As propriedades físicas dos sistemas, ao longo de uma transição de fase quântica, são abruptamente alteradas e, dessa forma, é interessante entender como a complexidade estatística do sistema poderia se comportar sob tais transições. Em nossa análise, como exemplo, estudamos o estado reduzido de partícula única do modelo de Ising quântico-1D e o estado reduzido de duas partículas do modelo de Heisenberg XXZ de *spin*-1/2. Esses dois modelos foram escolhidos nesta tese por serem muito estudados na literatura, por terem diagonalização analítica e possuírem pontos de transição de fase bem conhecidos.

A tese está organizada da seguinte forma: no Capítulo 2, discutimos a noção intuitiva da complexidade, em que abordamos alguns dos seus aspectos históricos, incluímos algumas das suas características conceituais e, também, apresentamos alguns comportamentos típicos de sistemas físicos denominados de “complexos”. No Cap. 3, exibimos a “*classical statistical complexity measure*”, *i.e.*, a medida de complexidade estatística clássica (CSCM), definida por López-Ruiz, Mancini e Calbet (LMC) em [21]. Na Sec. 3.4, aplicamos essa medida a um modelo simples de evolução temporal discreta caracterizada pelas cadeias de Markov finitas, em dimensão 2, para evoluções estocásticas e biestocásticas. No Cap. 4, introduzimos a contrapartida quântica desta medida: a “*quantum statistical complexity measure*”, ou seja, a medida de complexidade estatística quântica (QSCM). Apresentamos algumas propriedades desta medida e exibimos uma expressão analítica desta medida para um *qubit*, escrito na base de Bloch. Já no Cap. 5, discutimos dois exemplos e aplicações interessantes: o modelo de Ising 1D quântico (Sec. 5.5), em que computamos

¹Esse fato é garantido pelo análogo do “Teorema de Rolle” para o \mathbb{R}^N .

a medida de complexidade estatística quântica para o estado reduzido de um *qubit* no limite termodinâmico com o objetivo de determinar o ponto de transição de fase quântica. Determinamos, ainda, o ponto de transição quântica de primeira ordem e a transição de fase quântica contínua para o modelo de Heisenberg XXZ de *spin*-1/2, com $h = 0$, (Sec. 5.6), por meio da medida de complexidade estatística do estado reduzido de dois vizinhos (um estado de dois *qubits*), no limite termodinâmico. Por fim, apresentamos as considerações finais no Cap. 6.

2 O significado de complexidade

2.1 Noção intuitiva de complexidade

Uma noção intuitiva de complexidade poderia ser evidenciada pela definição usual: “o estado ou qualidade de ter muitas partes ou aspectos inter-relacionados; um objeto complexo é um arranjo de partes, tão intrincado que é difícil de entender ou de lidar” [22]. O problema da caracterização da complexidade qualitativamente e quantitativamente é um assunto vasto e em rápido desenvolvimento. Entretanto, ainda que várias definições e interpretações desse termo tenham avançado em diferentes disciplinas, não existe nenhuma definição global e abrangente para a complexidade [23, 24]. Originalmente, a maioria dos esforços foram desenvolvidos nos campos da ciência da informação, das ciências de dados e da ciência da computação. Recentemente, este tópico obteve um estímulo considerável na comunidade da física, em particular, em conexão com o estudo de transições de fase e dinâmica caótica. Outro grande interesse foi gerado pela construção dos primeiros modelos matemáticos da teoria da evolução em biologia, além de várias aplicações interessantes e promissoras em neurociência [1].

A complexidade, outrora um substantivo comum que descrevia objetos com muitas partes interconectadas, agora designa uma área de estudo com muitos ramos diferentes. Muitos sistemas importantes para a humanidade apresentam características complexas: mercados de valores financeiros, economias de trabalhadores hierarquizados em departamentos, empresas e indústrias; organismos multicelulares e suas inter-relações, a internet e seus usuários, servidores e sites; para nomear alguns deles. Cada um desses sistemas complexos exhibe uma propriedade peculiar denominada de *emergência*, descrita de maneira aproximada pela frase comum¹ que “a ação do todo é maior do que a soma das ações das diversas partes constituintes do sistema” [25, 26]. A emergência, em si, é uma propriedade sem uma definição rigorosa². Entretanto, é razoável imaginar que essa propriedade carrega a incapacidade de ser reduzida a uma função trivial da interação local entre as partes [27]. Além disso, sistemas complexos apresentam problemas para a epistemologia tradicional e também para o método analítico (que consiste em separar um sistema em partes, para fins de estudo). Essa separação do sistema em partes pode alterar consideravelmente as qualidades e as propriedades das próprias partes constituintes, que só podem ser razoa-

¹Os Beatles podem ser considerados como um fenômeno musical que possuía uma característica análoga à emergência. A qualidade musical do grupo excedia, em muito, a qualidade de cada um dos 4 músicos individualmente.

²Esta tese pertence ao ramo da física e, portanto, faz sentido que limitemos a definição do léxico “emergência” no domínio da mecânica quântica de muitos corpos, da física estatística, da informação quântica, *etc.*, como poderemos observar na Sec. 2.3.1.

velmente compreendidas por sua incorporação no todo. Esse fato pode ser descrito pelo seguinte paradoxo: “a compreensão do todo depende da compreensão das partes, entretanto, a compreensão das partes também depende da compreensão do todo” [26].

2.2 Uma introdução à perspectiva histórica do estudo em complexidade

A formulação contemporânea da complexidade se divide no estudo dos denominados *complex physical systems*, sistemas físicos complexos (CPS) e os *complex adaptive systems*, sistemas complexos adaptativos (CAS). Os CPS são aqueles onde as partes (subsistemas) se submetem a regras determinísticas e permanentes, ainda que o comportamento do todo (do sistema) se converta em imprevisível e caótico. Já os CAS consistem em sistemas nos quais as partes transformam, modificam as regras pelas quais o seu comportamento é regido. Nos CAS, os subsistemas ou partes são denominados de “agentes”. Sistemas autônomos, sociais, em geral, são entendidos como sistemas complexos adaptativos [26].

O estudo de sistemas físicos complexos, em geral, se concentra em arranjos geométricos (geralmente do tipo *lattice-like*) de elementos, nos quais as interações geralmente dependem apenas de efeitos propagados dos primeiros vizinhos mais próximos. Um dos primeiros estudos desses sistemas foi realizado por von Neumann (*cf.* [28]) em 1956. Nesse estudo, ele projetou uma máquina auto-reprodutora (que funcionava com um conjunto de engrenagens, eixos *etc.*) em uma matriz semelhante a um tabuleiro de xadrez, denominada de autômato celular. Cada um desses quadrados só pode estar em um conjunto fixo de estados distintos (cada quadrado poderia conter uma das 29 partículas diferentes); as mudanças de estado são determinadas pelas regras: por uma “lei universal” e uma “geometria” (essas regras são um análogo à “gravidade” e ao espaço 3D). Cada um dos estados muda, conforme ditado pelo estado dos outros quadrados circundantes. Com essa máquina, von Neumann, na verdade, construiu um padrão complexo, claramente um objeto não-vivo que era capaz de executar algoritmos arbitrários e poderia se reproduzir de maneira demonstrável [25, 27].

Embora a inferência de modelos concisos seja o objetivo principal de toda ciência, a primeira formalização desse problema pode ser encontrada na matemática discreta. O objeto em estudo é representado como uma sequência numérica de 0's e 1's, que pode ser periódica $\{011011\overline{011}\dots\}$, com período igual a $\overline{011}$, ou não-periódica, tal como, por exemplo, $\{01001100\ 01110101\ 01101100\ 01100001\ 01001100\ 01100001\ \dots\}$. Essa abordagem acarretou, inicialmente, duas disciplinas diferentes: a ciência da computação e a lógica matemática. Neste cenário, a complexidade de Kolmogorov de um padrão pode ser definida como o tamanho do menor programa (no caso da lógica matemática, um teorema), capaz de reproduzir o estado/cadeia de entrada [5, 6, 29]. É essencialmente o comprimento do

menor programa em um computador de uso geral necessário para gerar um determinado padrão, dividido pelo tamanho do próprio padrão. Para tornar essa definição significativa, é preciso considerar o limite de padrões infinitamente grandes. Desse modo, a complexidade de Kolmogorov seria uma espécie de informação “por unidade de *pixel*” ou de *bits* ou por letra armazenada neste padrão, no limite de padrões infinitamente grandes [30]. Como consequência dessa definição, os estados completamente aleatórios possuem complexidade máxima porque não é possível realizarmos nenhuma compressão em sua cadeia de *bits*. Na maioria das vezes, essa complexidade algorítmica coincide com a função entropia e, portanto, poderia ser considerada, nesses casos específicos, como uma medida do grau de “desordem” [12, 30].

Relacionada à complexidade algorítmica de Kolmogorov, a medida de complexidade baseada na “profundidade lógica”, isto é, *logical depth* (cf. [31]), se fundamenta como uma complexidade computacional relacionada ao tempo de execução do programa mais curto capaz de gerar uma *string* ou padrão. Ela também pode ser definida como a quantidade mínima de recursos computacionais, tais como tempo, memória, *etc.*, necessários para resolver uma determinada classe de problema.

A medida de complexidade relacionada à *thermodynamic depth*, ou seja, à “profundidade termodinâmica”, associa a entropia de um sistema ao número de caminhos históricos possíveis no espaço de fase que podem levar ao seu estado observado, foi definida por Lloyd e Pagels em 1988 (cf. [32]). Sistemas denominados de “profundos” seriam todos aqueles estados que são “difíceis de serem construídos” e cujo estado final carregaria muita informação sobre a história que levou à sua construção. Esta medida de complexidade poderia ser entendida como uma medida complementar à “profundidade lógica” de Bennett. O formalismo da profundidade termodinâmica captura, em sua essência, a quantidade de aleatoriedade criada por um processo, embora não diferencie, de maneira satisfatória, sistemas regulares de aleatórios.

A complexidade efetiva foi definida em 1995 por Gell-Mann como o comprimento mínimo da descrição das regularidades de um sistema [33]. Essa medida também está relacionada às medidas de complexidade algorítmicas. Entretanto, ela pretende diferenciar características aleatórias das incidentais e, desse modo, pertence a uma família que tem o objetivo de apreender a quantidade de “estrutura” que está contida em um sistema, ainda que a separação entre tais características sejam difíceis de serem compreendidas em qualquer sistema empírico, além de a medida depender fortemente de critérios de observação e descrição fornecidos.

Recentemente, a teoria da complexidade tornou-se associada à presença de um grande número de elementos interagentes em um sistema, e tem sido atribuída à ecologia, economia, biologia, aviação, gestão, computação, matemática, física, meio ambiente, sistemas imunológicos *etc.*, (cf. [34]). A primeira característica comum inequívoca desses

diversos campos consiste na visível dificuldade de se atingir um acordo razoável entre os modelos e as observações (e essa dificuldade pode não advir, necessariamente, de um comportamento caótico do sistema). A semelhança dos comportamentos não implica a existência de princípios gerais que regeriam esses sistemas denotados como “complexos”. Ao invés de procurarmos por uma teoria “*omnicomprensiva*”, dever-se-ia primeiramente buscar a concordância em um conjunto de características gerais típicas de um comportamento complexo e, desse modo, restringir o interesse a uma classe bem definida de sistemas que, de fato, compartilhem essas características. Esses atributos podem ser, por exemplo, a presença de transformações que podem ser classificadas como transições de “ordem e desordem”. Além disso, esses sistemas também possuem um certo grau de imprevisibilidade e dispõem de interações ou correlações entre os subsistemas que podem mudar drasticamente conforme a maneira na qual o sistema é dividido [1].

2.3 O conceito de complexidade

O sucesso da ciência moderna e do seu método experimental alcançou grande precisão e reprodutibilidade e, desse modo, muitas das teorias físicas foram descritas de maneira a gerarem previsões não-ambíguas. Assim, sempre que havia um desacordo razoável entre teoria e experimentos, forças externas imprevistas e “incontroláveis” ou conhecimento incompleto do estado do sistema eram atribuídos a essas possíveis dissonâncias.

Um bom exemplo de um modelo de sucesso consiste no modelo de um gás ideal. O estado de equilíbrio de um gás ideal é especificado por apenas dois observáveis macroscópicos independentes³ tais como: pressão e volume, por exemplo, e que estão relacionados por meio de equações de estado analíticas. Com o objetivo de obter uma descrição “suficiente” de um fenômeno, a compreensão “real” do sistema implicaria a realização de uma síntese a partir dos dados observados e a consequente eliminação de informações de variáveis que poderiam ser consideradas como irrelevantes na descrição do modelo.

Um gás ideal poderia ser imaginado, “pictoricamente”, como uma coleção de sub-regiões fundamentalmente independentes, cujos graus de liberdade internos poderiam ser desprezados com relativa segurança. Essas dificuldades foram superadas na mecânica estatística, ao postular a equiprobabilidade dos estados microscópicos acessíveis ao sistema, no equilíbrio. O sucesso da mecânica estatística em explicar, por exemplo, a condutividade elétrica, os calores específicos dos sólidos, a suscetibilidade magnética, *etc.*, demonstra a importância dessa abordagem, devido ao fato que a supressão de graus de liberdades dos constituintes do sistema, em favor das variáveis macroscópicas, pode não implicar, em muitos casos, à capacidade reduzida de realizar previsões de grande relevância científica [1].

³Um gás real é bem descrito pelo modelo de gás ideal se habitar o diagrama P - v - T em regiões com “baixas pressões” e “altas temperaturas” (em relação às temperaturas e pressões críticas de cada gás), *i.e.*, fora da região de saturação e com fator de compressibilidade $Z = 1$, ver [35], p. 50.

Dois problemas fundamentais concernentes à modelagem e formulação física das leis naturais são: a exequibilidade prática das previsões, dadas regras dinâmicas, além da seleção precisa das características relevantes do sistema. Assim como o estudo de sistemas não-lineares demonstrou, advindo, como, por exemplo, da dinâmica dos fluidos, incertezas arbitrariamente pequenas sobre condições iniciais podem ser amplificadas exponencialmente no tempo, na presença de um caos determinístico, no caso de sistemas hamiltonianos de muitas partículas. Essa dificuldade na descrição da interação entre muitas partículas e, também, na compreensão das correlações dinâmicas entre as várias partes de um sistema, torna muito difícil a sua compreensão e controle.

Nas vizinhanças dos pontos de transições de fase tais como ocorrem, por exemplo, em materiais magnéticos, irrompe uma organização hierárquica em subdomínios aninhados. O procedimento de *coarse-graining* de Kadanoff é baseado na divisão em células “microscopicamente grandes” em um modelo de *spin*, tal como um modelo de Ising, mas muito menores do que o comprimento de coerência e de correlação e, em seguida, tratamos a magnetização total dentro de cada célula como uma variável coletiva [36]. Este procedimento levou à formalização da teoria dos grupos de renormalização [37]. As transições de fase, no entanto, ocorrem em valores de parâmetros especiais (por exemplo, temperatura), enquanto as estruturas hierárquicas parecem ser uma característica muito mais geral da natureza desses sistemas complexos [1].

Em resumo, vimos que o conceito de complexidade está estreitamente ligado à noção de compreensão do sistema, na medida em que se baseia na precisão das descrições do modelo obtidas a partir de uma determinada quantidade de informação condensada sobre ele. Desse modo, uma boa “teoria da complexidade” pode ser imaginada como uma teoria de modelagem, que deveria abranger vários processos reducionistas (supressão de variáveis, separação de interações mais fracas das mais fortes, isolamento das correlações mais importantes, médias sobre subsistemas, *etc.*). Esta teoria deveria fornecer uma definição de complexidade e um conjunto de ferramentas para analisá-la. Ao definirmos “complexidade”, três pontos essenciais devem ser ponderados [1]:

1. A compreensão de um sistema complexo exige a presença de um sujeito que descreve um objeto/sistema por meio de previsões ou modelos. Filosoficamente, uma teoria da complexidade deveria ser uma “função” tanto do sujeito, quanto do objeto.
2. O objeto ou sistema, ou uma representação conveniente dele, deve ser apropriadamente dividido em partes que, por sua vez, podem ser subdivididas em subelementos, o que produziria uma hierarquia. Note-se que a hierarquia não precisa manifestar-se necessariamente no objeto, mas no modelo. Desse modo, a presença de uma estrutura hierárquica real não é um indicador inequívoco de complexidade.

3. Após codificação hierárquica do objeto, o sujeito se depara com o problema de estudar as interações e correlações entre subsistemas e de incorporá-las ao modelo. Essas interações e correlações em diferentes níveis de escala leva ao conceito de dimensionamento. Deve-se determinar se o aumento da resolução dentro da hierarquia estudada leva a uma imagem estável das interações, ou se elas simplesmente desaparecem.

Esses três pontos correspondem a um resumo descritivo do processo epistemológico de desenvolvimento de um modelo, com o objetivo de compreender um sistema que manifesta características complexas. Esses sistemas exibem vários tipos de comportamentos reveladores. Vamos citar brevemente algumas das características fundamentais desses sistemas:

- Auto-organização em padrões, como ocorre com bandos de pássaros, cardumes de peixes ou em colônias/enxames de insetos sociais;
- Comportamento caótico dinâmico, no qual pequenas mudanças nas condições iniciais produzem grandes modificações posteriores;
- Comportamento de “cauda gorda”, no qual eventos raros (por exemplo, extinções em massa e quedas abruptas no mercado financeiro) ocorrem com muito mais frequência do que seria previsto por uma distribuição normal;
- Interação adaptativa, no qual os agentes que interagem (como ocorrem nos mercados financeiros ou na teoria dos jogos) modificam suas estratégias de diversas maneiras à medida que a experiência se acumula;
- Quebra de simetria. Essas quebras podem significar assinaturas fundamentais de complexidade, principalmente se forem abruptas e inesperadas.

Além disso, como já mencionado, o comportamento emergente também é requisito essencial para chamar um sistema de “complexo”. Dessas características enumeradas acima, a emergência, a quebra de simetria ou a quebra de correlações desempenham um papel importante nessa tese. O problema de Ising nos fornece um exemplo de um sistema simples que é definido pela complexidade induzida pela emergência. Ao considerarmos uma rede $2D$, com um pequeno ímã em cada um dos pequenos domínios, poderíamos perguntar: “que orientações esses ímãs eventualmente tomarão, se começarem com os polos orientados de maneira aleatória?”. Uma possibilidade seria que todos os ímãs se alinhassem com os polos norte de quaisquer um deles opostos aos polos sul de seus vizinhos adjacentes. Entretanto, os ímãs geralmente se alinham em pequenos domínios nos quais, na borda de um domínio, os polos norte são opostos aos polos dos domínios adjacentes. Em vez de um sistema geral e uniforme, poderíamos ter uma simetria tal, que muitos domínios homogêneos pudessem ter orientações diferentes das dos seus vizinhos. Grosso modo, à

medida que os ímãs começam a alinhar-se, eles podem “congelar-se” em um estado com uma geometria análoga aos domínios dos grãos cristalinos em um sólido cristalino [25, 27].

2.3.1 Emergência e transições de fase

Um problema importante para a epistemologia de sistemas de muitos corpos consiste no estudo da manifestação das denominadas “emergências⁴”. Os fenômenos emergentes são qualidades ou padrões apresentados por um sistema complexo que não podem ser compreendidos pelas qualidades constituídas das partes que o constituem. Por exemplo, a “liquidez” da água (e conseqüentemente o comportamento do líquido) não advém da compreensão das qualidades da molécula de água (H_2O), nem pelas características individuais dos átomos constituintes (hidrogênio e oxigênio). A denominada “liquidez do líquido” emerge das interações entre essas moléculas, entretanto, não se limita a elas [26].

Uma conexão possível entre a emergência de um “fenômeno” físico macroscópico detectável e sistemas que sofrem transições de fase é o fato de que os sub-componentes de um certo sistema (microcomponentes) são rapidamente reconfigurados em uma macroestrutura qualitativamente diferente, ainda que esses microcomponentes permaneçam inalterados. Esta transformação macro é o que podemos notar como uma propriedade emergente, tal como, por exemplo, a magnetização total do sistema durante uma transição de fase.

Há a necessidade de diferenciarmos dois tipos de “emergência” em sistemas complexos, ainda que esses diferentes tipos não sejam completamente separados e independentes em alguns casos: *i.* emergências como o advento de propriedades holísticas não redutíveis às interações entre as partes e subsistemas de um sistema, e *ii.* emergências como o surgimento de propriedades do todo não suscetíveis de serem obtidas pela soma das contribuições de cada uma das partes de um sistema [26].

O fenômeno de emergência consiste no aparecimento de novas estruturas, padrões ou propriedades, em nível “macro”, durante o processo de auto-organização de um sistema complexo e que não se confunde com as partes ou com os subsistemas em interação. É um resultado global de correlações e interações que ocorrem no nível “micro”. Na termodinâmica de uma substância pura, os estados pré e pós transição de fase correspondem à configurações de microestados muito similares. As características em torno do ponto crítico são muito semelhantes (por exemplo, a energia cinética média das moléculas é aproximadamente igual antes e depois da transição) [38]. Desse modo, os processos de transição de fase podem ser entendidos como emergências de propriedades “macro” que advêm das interações que ocorrem no nível “micro”.

Solé e outros cientistas da complexidade entendem esses fenômenos de “transição de fase” em uma quantidade enorme de sistemas, desde os modelos físicos mais simples

⁴A “emergência” que interessa aqui, obviamente, advém do termo em português equivalente ao termo inglês *emergence*, e não *emergency*.

tais como o modelo de Ising clássico, mas também em vários outros sistemas biológicos e sociais [38]. Poderíamos, por exemplo, tentar investigar se a manifestação da violência étnica generalizada poderia ser explicada como um fenômeno que possui uma transição de fase: de uma fase com uma população não agressiva, porém mista e composta por indivíduos de duas etnias, para explosões abruptas de violência em um conflito universalizado.

A “multidão” é um padrão muito comum que emerge das interações simples entre muitas pessoas. Não é possível compreendermos o comportamento de uma grande aglomeração de pessoas a partir do entendimento de seus componentes isoladamente, porque a multidão é um fenômeno coletivo próprio, com várias idiosincrasias específicas [26]. Entretanto, Solé, *cf.* [38], trata algumas manifestações complexas como fenômenos de percolação⁵ e manifestações tais como rebeliões e incêndios florestais parecem ser mais plausivelmente tratadas como processos de percolação e não como sistemas que possuam algum tipo de emergência.

Um dos exemplos mais interessantes na história da vida na Terra foi o aparecimento do comportamento social entre animais tais como os insetos. É algo fascinante observar a constituição de sociedades complexas de indivíduos cooperantes tais como os coletivos de formigas, cupins, abelhas *etc.* Vários experimentos indicam nitidamente que a amplificação de perturbações por meio de interações individuais leva a respostas coletivas quase que instantâneas. Os estudos desses comportamentos de colônia (ou de enxame) poderiam possuir aplicações em várias áreas, tais como otimização combinatória, redes de comunicação e robótica [39].

Como as colônias de insetos sociais podem se comportar de maneira tão complexa, se as capacidades individuais dos indivíduos são relativamente limitadas? De maneira intuitiva, a ideia é que um coletivo de insetos pode estar em um estado de movimento aleatório em relação uns aos outros e, então, à medida em que uma variável muda, o conjunto se transforma em um enxame que possui um movimento global coordenado. A resposta para esta pergunta pode advir, em grande parte, da auto-organização: as sociedades de insetos podem compartilhar algumas propriedades dinâmicas básicas de outros sistemas físicos complexos [39].

2.3.2 Sistemas em equilíbrio não são complexos

Historicamente, a física tem se ocupado em estudar vários sistemas de “muitos corpos” e, em particular, sistemas que estão em equilíbrio (muitas vezes estável). Um gás ideal isolado termicamente do ambiente⁶ com temperatura e pressão constantes e um certo volume de areia em uma praia plana sem vento são exemplos de sistemas “grandes” e

⁵O fenômeno da *percolação* implica que há pelo menos um longo caminho que conectam pontos separados por uma distância da ordem do tamanho do próprio sistema.

⁶Aqui não iremos distinguir equilíbrio de equilíbrio quase-estático.

em equilíbrio. Se um sistema em equilíbrio é levemente perturbado, não devemos esperar que aconteçam comportamentos complexos interessantes, do ponto de vista científico, tais como grandes catástrofes, transições de fase e assim por diante [40].

Os únicos casos em que sistemas em equilíbrio podem apresentar comportamento complexo caracterizado por leis de potências ocorrem nos sistemas que apresentam transições de fase. As transições de fase aparecem quando o sistema passa de um estado dito “desordenado” para um estado denominado de “ordenado”, quando um dos parâmetros de controle do sistema é variado (tal como a temperatura, ou o campo magnético transversal externo, por exemplo). Existem, também, as transições entre fases com diferentes ordenações e organizações. Exatamente no ponto crítico que separa essas duas possíveis fases, um comportamento complexo emerge, caracterizado por correlações de longo alcance (livres de escala) e por domínios ordenados de todos os tamanhos [40].

A ideia que uma medida de complexidade pudesse realizar o papel de uma função sinalizadora dos pontos de transição de fase quântica adveio justamente dessas discussões apresentadas. A mudança entre diferentes padrões de ordem, ou entre um estado “desordenado” para um outro estado que possuísse um certo padrão de ordem poderia ser detectado por uma medida de complexidade quântica que fosse adequadamente definida. Com esse objetivo em mente, definimos a contrapartida quântica da medida de complexidade estatística clássica (CSCM) de López-Ruiz, Mancini e Calbet (LMC) e aplicamos em dois modelos hamiltonianos: o modelo de Ising Quântico $1D$ e o modelo de Heisenberg XXZ de *spin*- $1/2$.

2.3.3 Transições de fase quânticas e emaranhamento

Uma diferença fundamental entre a mecânica clássica e a quântica consiste na possível existência de correlações não-clássicas entre sistemas quânticos distintos. A propriedade física responsável por essas correlações é denominada de emaranhamento. Essas correlações são de natureza exclusivamente quântica e estão presentes, em princípio, em muitos dos sistemas e conjuntos de partículas quânticas que interagem globalmente. Espera-se que o emaranhamento *multipartite*, (*i.e.*, de muitas partes), desempenhe um papel fundamental nos fenômenos de transição de fase quântica, de modo equivalente ao que as correlações estatísticas clássicas realizam nas transições de fase clássicas [41].

Ao contrário das transições de fase clássicas, que ocorrem a uma temperatura diferente de zero, as flutuações em uma transição de fase quântica são totalmente quânticas. Durante uma transição de fase quântica (TFQ), no ponto crítico do espaço de parâmetros, correlações de longo alcance se desenvolvem no estado fundamental do modelo. A existência de um ponto de TFQ em um sistema quântico de muitos corpos influencia fortemente o comportamento do sistema próximo ao ponto crítico, com o desenvolvimento de correlações de longo alcance e um valor esperado diferente de zero para um parâmetro de ordem [42].

No entanto, como o sistema está em temperatura zero e, se assumirmos que não há degenerescência do estado fundamental, o sistema deve ser, portanto, um estado puro. Segue-se que as correlações que consistem na principal assinatura experimental de uma transição de fase quântica são devidas ao emaranhamento de longo alcance entre as várias partes no estado fundamental do sistema. Para sistemas que se aproximam de um ponto crítico, a estrutura do emaranhamento do estado fundamental deve sofrer uma transição. A evidência para tal transição foi obtida, primeiramente, para o modelo de Ising clássico bidimensional, com campo magnético transversal externo [43].

Em transições de fase em sistemas clássicos, no ponto crítico, um parâmetro de ordem diferente de zero caracteriza uma correlação de longo alcance dada pela divergência de comprimento de correlação. Da mesma forma nas TFQs, espera-se que o emaranhamento *multipartite* seja o maior valor possível (provavelmente máximo) no ponto crítico, e isso implicaria que todas as partes do sistema estariam emaranhadas entre si. Todavia, esta conjectura ainda não pôde ser provada em geral por medidas de emaranhamento conhecidas⁷ [41]. A grande maioria dos esforços na tentativa de responder essa questão foi na direção da utilização de medidas de emaranhamento *bipartite*, ambas calculadas para Modelos de Ising quânticos com campos magnéticos transversais.

Algumas medidas de emaranhamento utilizadas para o estudo das TFQs são: *i.* a concorrência entre pares de *spins* na cadeia [42, 44], *ii.* a entropia de emaranhamento entre parte da cadeia de *spins* (um bloco de *spins* de tamanho L) e o resto da cadeia (*cf.*: [44, 45]). Entretanto, nenhuma das medidas de emaranhamento referenciadas atinge o valor máximo possível para o emaranhamento quando o sistema se encontra no ponto crítico. Em [41], os autores demonstraram⁸ que o emaranhamento global, dado por $EG = 2 - \frac{2}{N} \sum_{j=1}^N \text{Tr}(\rho_j^2)$, (em que ρ_j representa a j -ésima matriz reduzida do sistema), atinge, de fato, um valor máximo no ponto crítico para o modelo de Ising com um campo magnético transversal no limite termodinâmico. Os mesmos autores provaram que há uma relação interessante entre a quantidade EG , a entropia de von Neumann, a entropia linear S_L , e o *2-tangle*, e mostraram que todas as essas quantidades são equivalentes para detectar as TFQ.

A técnica mais usual utilizada na mecânica estatística com o intuito de determinar as leis de potência que descrevem o decaimento polinomial das correlações no ponto

⁷Este problema é difícil devido à abundância de topologias de emaranhamento quando existem muitas partes (mais do que 2 ou 3 partes) em um sistema. Um bom exemplo para entender isso é observar a diferença do emaranhamento entre as 3 partes em cada um dos seguintes estados: $|GHZ\rangle = \frac{|000\rangle + |111\rangle}{\sqrt{2}}$, e $|W\rangle = \frac{|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle}{\sqrt{3}}$. Para uma maior discussão sobre esse assunto, veja a Sec. 4.2.

⁸No cenário *multipartite* existem medidas de emaranhamento que simplesmente são funções de somas de medidas de emaranhamento entre duas partes, tais como, por exemplo, o emaranhamento global, que é dado pela soma das concorrências entre um *qubit* e todos os outros. Entretanto, a primeira medida de emaranhamento multipartido que não é uma generalização direta nem uma combinação trivial de medidas bipartidas foi introduzida por Coffman *et al.* em [46], e foi denominado de *tangle*. A entropia linear S_L consiste nos primeiros termos da expansão em série de Taylor da entropia de von Neumann e é dada por $S_L \equiv 1 - \text{Tr}(\rho^2)$.

crítico de uma TFQ consiste na teoria de grupo de renormalização (RG), originalmente desenvolvida por Wilson em 1975, ver [47]. Técnicas de grupo de renormalização aplicadas à teoria quântica de campos e sistemas hamiltonianos estão, atualmente, bem desenvolvidas (para uma revisão sobre este assunto veja a Ref. [48]). Esta teoria, essencialmente, consiste no descarte, sucessivamente, de graus de liberdade não-dominantes em um sistema até que os termos dominantes possam ser identificados. Cada esquema de renormalização toma uma decisão sobre quais graus de liberdade em um sistema são importantes e essa decisão, por sua vez, determina para qual classe de sistemas o método é mais adequado [43].

Atualmente, um dos métodos mais bem sucedidos para o estudo das TFQ é denominado de *density matrix renormalization group* (DMRG), que consiste em uma técnica numérica que tem o objetivo de encontrar aproximações precisas para o estado fundamental e os primeiros estados excitados de sistemas hamiltonianos quânticos. Este método foi desenvolvido inicialmente por White, a princípio, em um esforço para superar as limitações do grupo de renormalização Wilson na descrição de modelos hamiltonianos quânticos unidimensionais [49–52].

O DMRG leva em consideração o emaranhamento entre o sistema S e o restante da rede. Para isso, o DMRG introduz um segundo subsistema da rede, o *environment* E (o ambiente). Fisicamente, escolhemos o ambiente E adequado (de tal modo que a maior parte do emaranhamento entre o sistema e a rede, *i.e.*, entre S -rede seja de fato o emaranhamento entre o bloco sistema e ambiente, isto é, S - E), e isso será verdade se o ambiente E contiver todos os sítios nos quais o sistema S se acopla mais fortemente. O segundo passo é renormalizarmos (de modo semelhante à renormalização *à la* Wilson) os operadores de S ao projetarmos nos graus de liberdade do sistema que mais contribuem para o estado fundamental do bloco emaranhado. A diferença entre as duas abordagens está em como o bloco é escolhido. No grupo de renormalização, esse subespaço é selecionado por meio de iteração até convergência, enquanto no DMRG a escolha é realizada levando-se em conta o emaranhamento do estado fundamental [42].

2.4 A complexidade estatística

As várias medidas de complexidade estatística permitem que diferentes sistemas físicos possam ser comparados entre si, por meio da aplicação de uma métrica comum. Isso é especialmente significativo para sistemas relacionados estruturalmente. As possíveis diferenças de complexidade estatística entre tais sistemas relacionados poderiam revelar estruturas, qualidades e aspectos de sua organização que estão relacionadas com a complexidade estatística.

Conforme discutido na Sec. 2.2, a maioria das medidas de complexidade existentes na literatura podem ser classificadas em duas grandes classes: *i.* As medidas algorítmicas

de conteúdo de informação que capturam a aleatoriedade, a capacidade de informação e a descrição de um processo/ algoritmo. Nessa categoria, os processos aleatórios e caóticos possuem maior complexidade, porque a compressão desses sistemas é menos possível. São incluídas em uma segunda categoria, as medidas que incluem: *ii*. A complexidade estatística (definidas por vários autores diferentes, alguns deles discutidos nesta tese), a complexidade física e a complexidade neural. Neste grupo, a complexidade emerge como categoria dissemelhante da aleatoriedade. Os sistemas complexos, nestas escalas, são os que possuem grande quantidade de estrutura ou informação codificada em estrutura de múltiplas escalas temporais ou espaciais. No âmbito desse conjunto de métricas, os sistemas que são ditos altamente complexos se posicionam em algum lugar entre os sistemas altamente ordenados, periódicos ou regulares, e os sistemas fortemente desordenados (e possivelmente caóticos). Entretanto, devemos ressaltar que uma expressão geral que associa inequivocamente a complexidade estatística de um sistema e o seu grau de ordem e desordem ainda não existe na literatura.

3 Medida de complexidade estatística clássica (CSCM)

Considere um sistema que possua N estados acessíveis $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$, quando observado em uma escala definida, e com uma determinada probabilidade intrínseca associada a cada um desses estados dada por $\vec{p} = \{p_i\}_{i=1}^N$, de cardinalidade $\text{card}(\vec{p}) = N$. Como discutido anteriormente, uma função, candidata para quantificar a “complexidade” da distribuição de probabilidade associada a um sistema físico, deve atribuir valor nulo para sistemas “simples”, tais como sistemas com um máximo grau de ordem associado, isto é, para distribuições de probabilidade puras: $\vec{p} = \{p_i = 1, p_{j \neq i} = 0\}$, para algum $i \in [1, N]$, e, também, atribuir zero para sistemas maximamente desordenados que são caracterizados por um vetor que consiste em uma distribuição uniforme $\vec{\mathcal{I}} = \{\mathcal{I}_i = 1/N\}$, para todo $i = 1, \dots, N$. Este vetor será denominado, a partir de agora, de “vetor uniforme”. Vamos abordar o caso de sistemas ordenados e desordenados separadamente.

3.1 Funções quantificadoras dos graus de ordem e de desordem

3.1.1 Grau de ordem

Um sistema físico que possui o grau máximo de ordem pode ser considerado como um sistema com uma alta simetria de todos os seus elementos. A distribuição de probabilidade que descreve tais sistemas é melhor representada por um vetor puro, que determina o estado do sistema como apenas uma configuração possível. Fisicamente, este é o caso de uma substância a temperatura zero Kelvin, ou um cristal perfeito, cujas regras de simetria restringem o estado acessível a um estado muito simétrico.

Com o objetivo de quantificar o grau de ordem de um determinado sistema, essa função deve atribuir valor máximo para distribuições de probabilidade puras e associar o valor zero para configurações equiprováveis. Uma função¹ capaz de quantificar tal grau de ordem é a distância² (induzida pela norma l_1) entre o vetor distribuição de probabilidade e o vetor uniforme [53]:

$$D(\vec{p}, \vec{\mathcal{I}}) = \|\vec{p} - \vec{\mathcal{I}}\|_1 = \sum_i \sqrt{\left(p_i - \frac{1}{N}\right)^2} = \sum_i \left|p_i - \frac{1}{N}\right|, \quad (3.1)$$

¹Os autores na Ref. [21] definiram a medida apenas por meio da distância euclidiana, (não normalizada, isto é, sem o fator $1/2$), induzida pela norma l_2 , (norma euclidiana), $D_2(\vec{p}, \vec{\mathcal{I}}) = \|\vec{p} - \vec{\mathcal{I}}\|_2 = \sqrt{\sum_i (p_i - \frac{1}{N})^2}$.

²Essas distâncias advêm das normas l_p , que são definidas como $\|x\|_p = \left\{\sum_i |x_i|^p\right\}^{1/p}$.

onde $\vec{\mathcal{I}}$ é um vetor cujos elementos são $\mathcal{I}_i = 1/N$, para todo $i = 1, \dots, N$. Esta função D , denominada na literatura como função *desequilíbrio*, quantifica o “grau de ordem” de um vetor de probabilidades. Ela determina o quão “longe” um estado está do estado maximamente misto, ou seja, esta função está relacionada a uma espécie de indicação de grau de pureza do estado. Ela é definida pela soma dos valores absolutos dos elementos do vetor $\vec{p} - \vec{\mathcal{I}}$. A medida de equilíbrio “ D ” possuirá valor zero para sistemas maximamente mistos (desordenados) e terá um valor máximo para sistemas maximamente ordenados, *i.e.*, puros.

3.1.2 Grau de desordem

Em contraste com um sistema ordenado, um sistema que possui o máximo grau de desordem é descrito por uma distribuição equiprovável. Isso significa uma probabilidade igual de ocorrer qualquer uma de suas configurações, como em um jogo de dados não-viciados, ou em uma função de partição de um gás ideal isolado.

De um ponto de vista estatístico, o vetor de probabilidades que descreve a característica de *equiprobabilidade* é o vetor uniforme, representado por $\vec{\mathcal{I}}$, conforme definido anteriormente. Pode-se definir o grau de desordem de um sistema como uma função que atribui valor zero para distribuições de probabilidades puras (associadas a distribuições maximamente ordenadas) e um valor máximo para uma distribuição de probabilidade uniforme; uma função bem conhecida capaz de quantificar o grau de desordem de um vetor de probabilidades é a entropia de Shannon:

$$H(\vec{p}) = - \sum_{i=1}^N p_i \log(p_i), \quad (3.2)$$

onde $\{p_i \geq 0\}$, $\forall i \in [1, N]$ e $\sum_{i=1}^N p_i = 1$. Dessa forma, a entropia de Shannon $H(\vec{p})$ atribuirá zero para sistemas maximamente ordenados, e um valor máximo para um vetor uniforme, ou melhor, irá atribuir $\log N$. A função \log é tomada na base 2 com o objetivo de quantificar o grau de desordem em *bits*.

3.2 Como quantificar a complexidade estatística clássica

Com os estados maximamente ordenados e maximamente desordenados definidos na escala de ordem e desordem, e com as Eqs. (3.1) e (3.2) em mente, respectivamente, “López-Ruiz, Mancini e Calbet (LMC)”, em [21], definiram uma medida de complexidade estatística construída como um produto dessas funções quantificadoras de “ordem e desordem”. Desse modo, devem existir estados intermediários de ordem e desordem que podem apresentar propriedades físicas interessantes e que podem estar associadas a comportamentos complexos. Portanto, nesse sentido, essa medida deve lidar com esses estados intermediários de complexidade estatística (medida nessa escala de ordem e

desordem), contida nesses sistemas. Podemos, assim, definir a complexidade estatística de um estado (um vetor de probabilidades) por meio de tal escala. Sendo assim, LMC definiram uma medida (Def. 1) capaz de quantificar a complexidade estatística de um sistema nessa escala [21]. Nesta tese, esta medida será denominada de medida de complexidade estatística clássica (CSCM), em função das suas principais características e propriedades e, também, devido ao fato que iremos construir a sua contrapartida quântica na Sec. 4.

3.2.1 Medida de complexidade estatística clássica (CSCM)

Uma função de *bona fide* candidata a quantificar a complexidade de uma distribuição de probabilidade deve satisfazer algumas propriedades: (*i.*) deve atribuir um valor mínimo (possivelmente zero) para extremos opostos da escala de ordem e desordem; (*ii.*) deve ser sensível a transições de padrões de ordem e desordem; (*iii.*) e deve ser computável. Portanto, a medida de complexidade estatística clássica foi definida por LMC conforme mostrado na Def. 1:

Definição 1 (medida de complexidade estatística clássica - *classical statistical complexity measure* - (CSCM)). *Consideremos um vetor de probabilidades dado por $\vec{p} = \{p_i\}_{i=1}^N$, com $\text{card}(\vec{p}) = N$, associado a uma variável aleatória X , e que representa todos os estados possíveis de um sistema. A função $\mathcal{C}(\vec{p})$ é uma medida da complexidade do sistema, na escala de ordem e desordem:*

$$\mathcal{C}(\vec{p}) = \frac{1}{\log N} H(\vec{p}) D(\vec{p}, \vec{\mathcal{I}}). \quad (3.3)$$

A função $\mathcal{C}(\vec{p})$ será nula para sistemas simples, tais como o modelo de gás ideal ou um cristal perfeito, e deve atingir um valor máximo para algum estado de complexidade intermediária.

Quando lidamos com distribuições de probabilidades compostas, tais como as descritas por duas ou mais variáveis aleatórias, é possível calcular tanto a CSCM da distribuição composta, quando as das distribuições marginais. Esta definição poderia tornar-se fundamental em vários contextos em que possuímos apenas um conhecimento marginal das distribuições de probabilidade. Portanto, na Def. 2 definimos a medida de complexidade estatística clássica para distribuições de probabilidades conjuntas e também para distribuições de probabilidades marginais [53]:

Definição 2 (medida de complexidade estatística clássica de distribuições de probabilidades conjuntas e de distribuições de probabilidades marginais). *Dada uma distribuição conjunta conhecida de duas variáveis aleatórias discretas X e Y , dadas por $p(x_i, y_j)$, e de dimensão³ global N , com $N = \text{card}(\vec{p}_{XY})$ e com dimensões locais dadas por N_X e N_Y ,*

³Aqui iremos definir somente o caso da CSCM para variáveis discretas. A extensão para variáveis contínuas é trivial e deverá seguir as mesmas ideias trabalhadas na Sec. 3.3.3.

com $N_X = \text{card}(\vec{p}_X)$ e $N_Y = \text{card}(\vec{p}_Y)$, pode-se definir a CSCM da distribuição conjunta $\mathcal{C}_{XY}(\vec{p}_{XY}(x_i, y_j))$ pela Eq. (3.4)

$$\mathcal{C}_{XY}(\vec{p}_{XY}(x_i, y_j)) = \frac{1}{\log N} H(\vec{p}_{XY}(x_i, y_j)) D(\vec{p}_{XY}(x_i, y_j), \vec{\mathcal{I}}), \quad (3.4)$$

e da mesma forma, definimos a CSCM das duas distribuições marginais, $\mathcal{C}_X(\vec{p}_X(x_i))$, pela Eq. (3.5) e $\mathcal{C}_Y(\vec{p}_Y(y_j))$, pela Eq. (3.6)

$$\mathcal{C}_X(\vec{p}_X(x_i)) = \frac{1}{\log N_X} H(\vec{p}_X(x_i)) D(\vec{p}_X(x_i), \vec{\mathcal{I}}_X), \quad (3.5)$$

$$\mathcal{C}_Y(\vec{p}_Y(y_j)) = \frac{1}{\log N_Y} H(\vec{p}_Y(y_j)) D(\vec{p}_Y(y_j), \vec{\mathcal{I}}_Y), \quad (3.6)$$

onde \vec{p}_X e \vec{p}_Y são funções de densidade de probabilidade marginais dadas pelas expressões $\vec{p}_X(x_i) = \sum_{j=1}^{N_Y} \vec{p}_{XY}(x_i, y_j)$, e $\vec{p}_Y(y_j) = \sum_{i=1}^{N_X} \vec{p}_{XY}(x_i, y_j)$. Os vetores uniformes $\vec{\mathcal{I}}_X$ e $\vec{\mathcal{I}}_Y$ estão definidos nas dimensões apropriadas⁴.

Além do fato já discutido da importância de termos a Def. 2 no caso de possuímos o conhecimento marginal do estado do sistema, esta definição se torna necessária, no caso clássico, por completeza, já que iremos necessitar deste conceito quando formos definir a contrapartida quântica da CSCM, a QSCM. No caso da medida quântica iremos utilizar o conceito de traço parcial de um estado quântico de várias partes. A generalização da CSCM para variáveis contínuas é direta e foi realizada nas Refs. [54, 55], veja a Sec. 3.3.3. Da mesma forma, também poderíamos generalizar a Def. 2 para lidar com densidades de probabilidade condicionais discretas e contínuas tais como $\vec{p}(x|y)$ ou $\vec{p}(y|x)$, que também poderão ser úteis em alguns outros contextos mais gerais e deveriam ser explorados em trabalhos futuros [53].

A medida de complexidade estatística clássica depende da natureza da descrição associada a um sistema e da escala de observação [21]. Esta função, generalizada como um funcional da distribuição de probabilidade, tem relação com uma série temporal gerada por um sistema dinâmico clássico [56].

Dois ingredientes são fundamentais para definir tal quantidade: o primeiro é uma função do tipo entropia que quantifica a informação contida em um sistema, tal como, por exemplo, a entropia de Tsallis [57], Escort-Tsallis [58] ou entropia Rényi [59, 60]. O outro ingrediente é a definição de uma função de distância no espaço de probabilidades, que indica o desequilíbrio relativo a uma distribuição fixa de interesse (nesta tese, iremos considerar somente a distância do vetor de probabilidades que representa o sistema ao vetor uniforme). Para este propósito, podemos usar uma distância euclidiana (ou alguma outra norma l_p qualquer [56, 61]), a distância Bhattacharyya [62] ou a distância de Wootters [63].

Também podemos aplicar uma medida de divergência estatística, por exemplo, a entropia relativa clássica [64], a distância de Hellinger e, também, a divergência de

⁴Aqui, resolvemos os possíveis problemas de interpretação das dimensões (dimensão global N e dimensões das distribuições marginais N_X e N_Y), que poderiam ocorrer em [53].

Jensen-Shannon [65]. Observamos o aparecimento muitas outras versões generalizadas de medidas de complexidade nas últimas décadas, e essas funções provaram ser úteis em alguns ramos da teoria da informação clássica [7, 66–73].

3.3 Algumas propriedades e aplicações de algumas medidas de complexidade clássicas

3.3.1 CSCM para $N = 2$ por meio da norma l_2

Baseado na definição de CSCM (Eq. 3.3), que consiste no produto da informação armazenada no sistema com o seu desequilíbrio em relação à distribuição de equilíbrio (vetor uniforme), podemos exibir uma expressão analítica para a medida clássica para $N = 2$, por meio da função desequilíbrio definida por meio da norma l_2 , isto é, $D_2(\vec{p}, \vec{\mathcal{I}}) = \|\vec{p} - \vec{\mathcal{I}}\|_2 = \sum_i \left(p_i - \frac{1}{2}\right)^2$, para $\{\vec{p} = (p_1, p_2)^T\}$, e o vetor uniforme é dado por $\vec{\mathcal{I}} = (1/2, 1/2)^T$. O vetor distribuição de probabilidades pode ser escrito como: $p_1 = x$ e $p_2 = 1 - x$, com $p_1 + p_2 = 1$, [21]. Vamos definir, (sem perda de generalidade), $p_1 \equiv x < 1/2$. Portanto, $-x > -1/2$ e $p_2 \equiv 1 - x > 1/2$. Os casos em que $p_1 = 1$ e $p_2 = 0$, ou que $p_1 = 0$ e $p_2 = 1$, ou ainda $p_1 = 1/2$ e $p_2 = 1/2$ são triviais, porque implicam $\mathcal{C}(x) = 0$.

$$\mathcal{C}(x) = \frac{1}{\log 2} H(x) D_2(x, 1/2), \quad (3.7)$$

$$\mathcal{C}(x) = -\frac{2}{\log_2 2} \left[x \log \left(\frac{x}{1-x} \right) + \log(1-x) \right] \left(x - \frac{1}{2} \right)^2. \quad (3.8)$$

3.3.2 CSCM para $N = 2$ por meio da norma l_1

De maneira semelhante à realizada na Sec. 3.3.1, podemos calcular analiticamente a medida de complexidade estatística clássica para $N = 2$, por meio da função desequilíbrio definida por meio da norma l_1 , isto é $D_1(\vec{p}, \vec{\mathcal{I}}) = \|\vec{p} - \vec{\mathcal{I}}\|_1 = \sum_i \sqrt{\left(p_i - \frac{1}{2}\right)^2} = \sum_i \left| p_i - \frac{1}{2} \right|$, para $\{\vec{p} = (p_1, p_2)^T\}$, e o vetor uniforme, dado por $\vec{\mathcal{I}} = (1/2, 1/2)^T$. O vetor distribuição de probabilidades pode ser escrito como: $p_1 = x$ e $p_2 = 1 - x$, com $p_1 + p_2 = 1$, [21]. Da mesma forma e com as mesmas definições realizadas na Sec. 3.3.1, teremos (ver [53]):

$$\mathcal{C}(x) = \frac{1}{\log 2} H(x) D_1(x, 1/2), \quad (3.9)$$

$$\mathcal{C}(x) = -\frac{2}{\log_2 2} \left[x \log \left(\frac{x}{1-x} \right) + \log(1-x) \right] \left| x - \frac{1}{2} \right|. \quad (3.10)$$

3.3.3 CSCM para variáveis contínuas

Com o objetivo de estender a medida de complexidade estatística clássica (CSCM) para variáveis contínuas, os autores nas Refs. [21, 55] calcularam primeiramente a entropia de Shannon para uma distribuição contínua $\{p(x)\}$, com suporte no intervalo $[-L, L]$ e

com $\int_{-L}^L p(x)dx = 1$. Primeiramente dividimos o intervalo em $\Delta x = \frac{2L}{N}$, de tal modo que $\Delta x = x_i - x_{i-1}$, com $i = 1, \dots, N$ e $x_0 = -L$ e $x_N = L$. Inicialmente consideramos um distribuição discreta aproximada: $\vec{p} = \{p_i\} = \{p(\bar{x}_i)\Delta x\}$, com $\bar{x}_i \in [x_{i-1}, x_i]$. Desse modo, a entropia de Shannon $H(\vec{p})$ pode ser escrita como:

$$H(\vec{p}) = - \sum_{i=1}^N p(\bar{x}_i) \log(\bar{x}_i) \Delta x - \underbrace{\sum_{i=1}^N p(\bar{x}_i) \log(\Delta x) \Delta x}_{2^\circ \text{Termo}}. \quad (3.11)$$

O segundo termo da Eq. 3.11 tende a zero à medida que $N \rightarrow \infty$, devido ao fato de $\lim_{N \rightarrow \infty} \log(\Delta x) \Delta x = \lim_{N \rightarrow \infty} \log\left(\frac{2L}{N}\right) \frac{2L}{N} \rightarrow 0$. Portanto, o limite das somas de Riemann converge para a integral escrita na Eq. 3.12:

$$H(p(x)) = - \int_{-L}^L p(x) \log(p(x)) dx. \quad (3.12)$$

No caso contínuo, a distribuição retangular $\mathcal{I}(x)$ é a generalização natural de uma distribuição uniforme (vetor uniforme), no intervalo $[-L, L]$, e pode ser escrita como:

$$\mathcal{I}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2L}, & \text{se } x \in [-L, L]; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.13)$$

Dessa maneira, a função de desequilíbrio, definida por meio da norma euclidiana, dada por $D_2^*(p(x) - \mathcal{I}(x))$, pode ser escrita pela Eq. 3.14:

$$D_2^*(p(x) - \mathcal{I}(x)) = \int_{-L}^L \left(p(x) - \frac{1}{2L}\right)^2 dx = \int_{-L}^L p(x)^2 dx - \frac{1}{2L}. \quad (3.14)$$

Definiremos a translação $D_2(p(x) - \mathcal{I}) = D_2^*(p(x) - \mathcal{I}(x)) + \frac{1}{2L} = \int_{-L}^L p(x)^2 dx$, como função de desequilíbrio. Finalmente, a extensão da CSCM para variáveis contínuas pode ser escrita como:

$$\mathcal{C}(p(x)) = H(p(x)) \cdot D_2(p(x) - \mathcal{I}(x)) = \left(- \int_{-L}^L p(x) \log(p(x)) dx\right) \cdot \left(\int_{-L}^L p(x)^2 dx\right). \quad (3.15)$$

A segunda integral na Eq. 3.15, que consiste na função de desequilíbrio transladada, $D_2(p(x) - \mathcal{I}(x)) = \int_{-L}^L p(x)^2 dx$ representa uma espécie de pureza e seria o análogo clássico da pureza P de um estado quântico diagonal, (no caso discreto seria $\rho = \text{diag}\{p_i\}$), e a pureza seria igual a: $P = \text{tr}(\rho^2)$.

3.3.3.a CSCM para uma distribuição gaussiana

Suponhamos um contínuo de estados representado pela variável x , cuja densidade de probabilidade $p(x)$ seja dada pela distribuição normal de variância igual a σ e média nula:

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right). \quad (3.16)$$

As expressões obtidas para entropia de Shannon $H(p(x))$, para o desequilíbrio $D_2(p(x) - \mathcal{I}(x))$ e para a CSCM, *i.e.*, $\mathcal{C}(p(x))$ da distribuição gaussiana dada pela Eq. 3.16, são apresentadas, respectivamente, pelas equações: Eq. 3.17, Eq. 3.18 e, também, pela Eq. 3.19 (*cf.* [74]):

$$H(p(x)) = - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log(p(x)) dx = \left(\frac{1}{2} + \log(\sigma\sqrt{2\pi})\right); \quad (3.17)$$

$$D_2(p(x) - \mathcal{I}) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x)^2 dx = \frac{1}{2\sigma\sqrt{\pi}}; \quad (3.18)$$

$$\mathcal{C}(p(x)) = H(p(x)) \cdot D_2(p(x) - \mathcal{I}(x)) = \frac{1}{2\sigma\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2} + \log(\sigma\sqrt{2\pi})\right). \quad (3.19)$$

A condição que $H(p(x)) \geq 0$ implica que $\sigma \geq \sigma_{min} = (2\pi e)^{-\frac{1}{2}}$, o valor máximo para a CSCM pode ser obtido analiticamente de maneira simples [74]. O ponto de máximo ocorre quando $\sigma = \sigma_{max} = \sqrt{\frac{e}{2\pi}}$.

3.3.3.b CSCM para uma distribuição exponencial

Consideremos agora uma distribuição de probabilidades exponencial de variância γ dada pela Eq. 3.20. Da mesma forma da Sec. 3.3.3.a,

$$p(x) = \begin{cases} \frac{1}{\gamma} e^{-x/\gamma}, & \text{se } x > 0; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.20)$$

As expressões obtidas para entropia de Shannon $H(p(x))$, para o desequilíbrio $D_2(p(x) - \mathcal{I}(x))$ e para a CSCM $\mathcal{C}(p(x))$ da distribuição exponencial, dada pela Eq. 3.20, são apresentadas, respectivamente, pela Eq. 3.21, Eq. 3.22 e, também, pela Eq. 3.23 (*cf.* [74]):

$$H(p(x)) = - \int_0^{+\infty} p(x) \log(p(x)) dx = (1 + \log(\gamma)); \quad (3.21)$$

$$D_2(p(x) - \mathcal{I}) = \int_0^{+\infty} p(x)^2 dx = \frac{1}{2\gamma}; \quad (3.22)$$

$$\mathcal{C}(p(x)) = H(p(x)) \cdot D_2(p(x) - \mathcal{I}(x)) = \frac{1}{2\gamma} (1 + \log(\gamma)). \quad (3.23)$$

A condição que $H(p(x)) \geq 0$ implica que $\gamma \geq \gamma_{min} = 1/e$, o valor máximo para a CSCM para a distribuição exponencial pode ser obtido analiticamente. O ponto de máximo ocorre quando: $\gamma = \gamma_{max} = 1$, veja na Ref. [74].

3.4 Evolução temporal discreta da CSCM para $N = 2$

Todos os resultados exibidos na Sec. 3.4 são novos, e ainda não estão publicados em nenhum periódico.

3.4.1 Cadeias de Markov, mapas estocásticos e biestocásticos

A evolução temporal discreta de um vetor de probabilidades no espaço de probabilidades (também denominado de “simplexo” de probabilidades) se dá por meio de mapas estocásticos e biestocásticos, que consistem na aplicação iterada dessas matrizes em um vetor de probabilidades inicial.

Com o objetivo de compreendermos essa evolução temporal em tempos discretos da medida de complexidade estatística clássica (CSCM), devemos descrever como um vetor de probabilidades evolui dentro do espaço de probabilidades. Posteriormente, estes conceitos e resultados poderão ser importantes para compreendermos as evoluções ou mapas estocásticos e biestocásticos quânticos no espaço de Hilbert-Schmidt para um estado quântico ρ .

O exemplo mais simples de um processo estocástico é aquele em que cada variável aleatória é condicionalmente independente de todas as outras variáveis precedentes e depende apenas daquelas que as precedem imediatamente. Podemos dizer que, dado o tempo presente, o futuro é condicionalmente independente do passado [75]. Tal processo é denominado de Markov ou markoviano. Fisicamente, a suposição de markovianidade corresponde a assumir que o ambiente causador do ruído em uma parte do processo X atua independentemente do ambiente causador do ruído em uma outra determinada parte Y , (se modelarmos um processo físico como um processo estocástico consistindo por $X \rightarrow Y$ [76]). Por simplicidade, iremos assumir aqui que todas as cadeias de Markov são invariantes no tempo, isto é, que as probabilidades condicionais $p(x_n|x_{n-1})$ não dependerão do tempo discreto ou iteração n .

Definição 3 (cadeia de Markov). *Um processo estocástico discreto é uma cadeia de Markov para $n = 1, 2, \dots$, se a probabilidade⁵ $Prob(X_{n+1} = x_{n+1}|X_n = x_n, X_{n-1} = x_{n-1}|\dots|X_1 = x_1) = Prob(X_{n+1} = x_{n+1}|X_n = x_n)$. Neste caso, a probabilidade conjunta⁶ é definida como*

⁵Aqui usamos a notação $Prob(\cdot) = Pr(\cdot)$ quando a variável aleatória X_n possui o valor x_n , isto é, quando $X_n = x_n$. A notação $p(x_1)$ é uma abreviação e significa $Prob(X_1 = x_1)$.

⁶Aqui usamos a propriedade de Markov no teorema de Bayes (regra da cadeia para probabilidades): $Prob(X_1, \dots, X_n) = Prob(X_n \cap \dots \cap X_1) = \prod_{k=1}^n Prob(X_k|\bigcap_{j=1}^{k-1} X_j)$, veja a Ref. [77].

$p(x_1, x_2, \dots, x_n) = p(x_1)p(x_2|x_1)p(x_3|x_2) \cdots p(x_n|x_{n-1})$. Uma “boa” notação para uma cadeia de Markov é $\{X_i\}$.

Se $\{X_i\}$ é uma cadeia de Markov, então, X_n é definida como o estado da cadeia no tempo n . Uma cadeia de Markov invariante no tempo é caracterizada pelo vetor de probabilidades inicial e a matriz de transição $S = S_{ij}$, $\forall i, j \in \{1, 2, \dots, m\}$, em que $S_{ij} = \text{Prob}(X_{n+1} = j | X_n = i)$ [75].

Admitamos que conhecemos o estado inicial em um tempo $n \in \mathbb{N}$, (o vetor de probabilidades $p(x_n)$) e queremos descobrir o estado num tempo $n + 1$, então basta calcularmos: $p(x_{n+1}) = \sum_{x_n} S_{\{x_n, x_{n+1}\}} p(x_n)$. Desse modo, as probabilidades posteriores são relacionadas às probabilidades anteriores por um processo linear mapeado em uma matriz de transição de probabilidades. Esta característica de linearidade é ecoada também nas descrições físicas dos ruídos quânticos, simplesmente com matrizes densidade que substituirão as distribuições de probabilidade [76, 77]. Se o estado em um determinado tempo n for constante para todo instante posterior, isto é, para $n + 1, n + 2, \dots$, então esse estado é denominado de distribuição estacionária. Suponhamos que $\vec{\pi} = S\vec{\pi}$, $\forall n$, então $\vec{\pi}$ é uma distribuição estacionária.

Teorema 1. *A matriz de transição de uma cadeia de Markov é estocástica.*

Prova:⁷ Vamos denominar as matrizes estocásticas de S . Uma matriz é estocástica por colunas se a soma dos elementos de cada uma das suas colunas for igual a 1. Ela será estocástica por linhas se a soma dos elementos de cada uma das suas linhas for igual a 1.

A demonstração do Teo. 1 é muito simples, devido ao fato da soma, em j , de todas as probabilidades de transição de um determinado estado i qualquer para todos os estados j ser igual a 1. Desse modo, a matriz de transição tem que ser uma matriz estocástica $S_{ij} = \text{Prob}(X_{n+1} = j | X_n = i)$, então a soma, para todos os estados j , será dada por: $\sum_j S_{ij} = \sum_j \text{Prob}(X_{n+1} = j | X_n = i) = 1$. Nesta tese, iremos utilizar somente matrizes estocásticas por colunas. \square

Teorema 2. *Seja $\mathcal{M}(N)$ o espaço de matrizes estocásticas de dimensão N . Em dimensão $N = 2$, o produto de duas matrizes estocásticas $S_1 \in \mathcal{M}(2)$ e $S_2 \in \mathcal{M}(2)$, logo, $S = S_1 \cdot S_2$ é uma matriz estocástica⁸.*

Prova: As provas gerais dos teoremas desta seção são muito simples. Nesta tese, iremos provar somente os casos para a dimensão $N = 2$. Sejam S_1 e S_2 matrizes estocásticas

⁷Os teoremas provados nesta seção são resultados triviais e muito conhecidos na literatura, entretanto, fizemos a escolha de demonstrar os casos mais importantes, em dimensão $N = 2$, com base no formalismo apresentado e, também, com o propósito da tese. Essa escolha foi baseada no fato de que as demonstrações exibidas são diferentes da maioria das apresentadas pelos livros textos básicos e poderão ser úteis para futuros estudantes que se iniciam no tema. Para mais informações ver: [75, 78–84].

⁸É trivial observar que esse teorema vale para qualquer dimensão $N \in \mathbb{N}$, com $N > 2$.

por colunas, definidas pelos números reais a, b, c e d , com $\{a, b, c, d\} \in (0, 1)$.

$$S_1 = \begin{pmatrix} 1-a & b \\ a & 1-b \end{pmatrix}, \quad (3.24)$$

e

$$S_2 = \begin{pmatrix} 1-c & d \\ c & 1-d \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

Portanto, $S = S_1 \cdot S_2$ é uma matriz estocástica por colunas e pode ser escrita como:

$$S = S_1 \cdot S_2 = \begin{pmatrix} (1-a)(1-c) + bc & b(1-d) + (1-a)d \\ a(1-c) + (1-b)c & (1-b)(1-d) + ad \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

É simples observar que a matriz S é estocástica por colunas, isto é, $[(1-a)(1-c) + bc] + [a(1-c) + (1-b)c] = 1$ e que também $[b(1-d) + (1-a)d] + [(1-b)(1-d) + ad] = 1$. \square

Corolário 1. *Seja $S \in \mathcal{M}(2)$ uma matriz estocástica. Logo, $S^m = \underbrace{S \cdot S \cdots S}_{m \text{ vezes}}$, para $m \in \mathbb{N}$ é também uma matriz estocástica.*

Prova: Dada uma matriz estocástica $S \in \mathcal{M}(2)$:

$$S = \begin{pmatrix} 1-a & b \\ a & 1-b \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

Para provar o Corolário, basta calcular a matriz $S^m \in \mathcal{M}(2)$:

$$S^m = \begin{pmatrix} \frac{a(1-a-b)^m}{a+b} + \frac{b}{a+b} & \frac{b}{a+b} - \frac{(1-a-b)^m b}{a+b} \\ \frac{a}{a+b} - \frac{a(1-a-b)^m}{a+b} & \frac{a}{a+b} + \frac{(1-a-b)^m b}{a+b} \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Esta matriz S^m é trivialmente estocástica por colunas, como pode ser observado diretamente: $[\frac{a(1-a-b)^m}{a+b} + \frac{b}{a+b}] + [\frac{a}{a+b} - \frac{a(1-a-b)^m}{a+b}] = 1$ e $[\frac{b}{a+b} - \frac{(1-a-b)^m b}{a+b}] + [\frac{a}{a+b} + \frac{(1-a-b)^m b}{a+b}] = 1$. \square

Teorema 3. *Seja B uma matriz biestocástica⁹. Logo, $B^m = \underbrace{B \cdot B \cdots B}_{m \text{ vezes}}$, para $m \in \mathbb{N}$ é também uma matriz biestocástica.*

Prova: Seja a matriz $B \in \mathcal{M}(2)$ uma matriz biestocástica dada por:

$$B = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ a & 1-a \end{pmatrix}, \quad (3.29)$$

Novamente basta calcularmos B^m , que pode ser escrita como:

$$B^m = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1-2a)^m & \frac{1}{2} - \frac{1}{2}(1-2a)^m \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2}(1-2a)^m & \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1-2a)^m \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

A matriz B^m é trivialmente biestocástica porque as somas das linhas ou das colunas é igual a: $[\frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1-2a)^m] + [\frac{1}{2} - \frac{1}{2}(1-2a)^m] = 1$. \square

⁹Uma matriz $B \in \mathcal{M}(2)$, de dimensão $n \times n$, é biestocástica se $0 \leq B_{ij} \leq 1$, $(\forall i, j \in [1, n])$ e $\sum_{i=1}^n B_{ij} = \sum_{j=1}^n B_{ij} = 1$. Precisamos excluir alguns casos óbvios de matrizes biestocásticas, tais como a matriz identidade, além de $\mathbb{I} \oplus B$ e $B \oplus \mathbb{I}$, para alguma matriz biestocástica B e assim por diante.

Teorema 4. *Sejam as matrizes $B \in \mathcal{M}(2)$ e $B^m \in \mathcal{M}(2)$ matrizes biestocásticas, definidas na Eq. (3.29), com $0 < a < 1$, e seja a seguinte sequência de vetores probabilidade de dimensão $n = 2$, definidos por uma cadeia de Markov irredutível dada por $\{\vec{p}(x_0), \vec{p}(x_1) = B^1 \vec{p}(x_0), \vec{p}(x_2) = B^2 \vec{p}(x_0), \dots, \vec{p}(x_m) = B^m \vec{p}(x_0)\}$, dada por meio da aplicação: $\vec{p}(x_m) = B^m \cdot \vec{p}(x_0)$, e definida no conjunto de tempos discretos $t = \{1, 2, \dots, m, \dots\}$, então o estado limite desta sequência será dado por $\vec{\pi} = \lim_{m \rightarrow \infty} B^m \vec{p}(x_0) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})^T$.*

Prova: A demonstração do caso geral é muito simples, entretanto, para esta tese, iremos exibir somente o caso da dimensão $N = 2$. Seja $\vec{p}(x_0) = (x_1, x_2)^T$ um vetor de probabilidades inicial qualquer, com: $x_1 > 0$, $x_2 > 0$ e $x_1 + x_2 = 1$. Vamos escrever a matriz B e B^m , como matrizes biestocásticas por colunas, com $0 < a < 1$, da mesma forma que foi definida na Eq. 3.29 e Eq. 3.30, respectivamente. Desse modo, teremos:

$$\vec{\pi} = \lim_{m \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} 1-a & a \\ a & 1-a \end{pmatrix}^m \cdot \vec{p}(x_0), \quad (3.31)$$

$$\vec{\pi} = \lim_{m \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1-2a)^m & \frac{1}{2} - \frac{1}{2}(1-2a)^m \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2}(1-2a)^m & \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1-2a)^m \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

Para demonstrar o teorema basta aplicar o limite na Eq. 3.32: uma solução:

$$\vec{\pi} = \lim_{m \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(x_1 + (1-2a)^m x_1 + x_2 - (1-2a)^m x_2) \\ \frac{1}{2}(x_1 - (1-2a)^m x_1 + x_2 + (1-2a)^m x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

A Eq. 3.33 é verdadeira, isto é, o limite existe se $0 < a < 1$. \square

O teorema fundamental do limite das cadeias de Markov irredutíveis, veja a Ref. [80], afirma que, se existe uma distribuição estacionária para uma dada matriz de transição, ela deve ser única, portanto, a distribuição uniforme $\vec{\mathcal{I}} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})^T$, deve ser a distribuição estacionária única para todas as matrizes biestocásticas, e qualquer $\vec{p}(x_0)$ inicial deve convergir para: $\vec{\pi} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})^T$, cf. [80].

3.4.2 CSCM para cadeias de Markov em dimensão $N = 2$

Na Sec. 3.4, estudamos alguns teoremas básicos das cadeias finitas de Markov. A abordagem usual para esse estudo é determinar o espaço de estados (nesta tese utilizamos um espaço de dimensão $N = 2$, por simplicidade), calcular as probabilidades relevantes, (e com isso escrever as matrizes estocásticas ou biestocásticas que descrevem o processo estocástico), determinar os estados estacionários e, dado um estado inicial, estimar os tempos esperados para a convergência até a distribuição estacionária de equilíbrio [79]. A estratégia para resolvermos um determinado problema relacionado com uma cadeia de Markov por meio da teoria descrita na Sec. 3.4 deveria conter os seguintes passos:

- Encontrar (caso exista) a matriz de transição P , tal que a cadeia associada seja irreduzível e aperiódica¹⁰, de tal maneira que exista somente uma única distribuição de probabilidades estacionária;
- Determinar um número m , “grande” o suficiente, de tal maneira que a distribuição de probabilidades $\vec{p}^{(m)}$ esteja suficientemente “próxima” à distribuição estacionária $\vec{\pi}$.

Poder-se-ia suspeitar que este procedimento é desnecessariamente complicado: não seria muito mais simples projetarmos uma matriz de transição especial $P = S_{\pi}$ (uma matriz onde todas as colunas são idênticas à distribuição estacionária $\vec{\pi}$)? Matematicamente isso estaria correto, e o tempo discreto m seria igual a 1 para este caso. Para fins práticos, no entanto, essa ideia é inútil dado que em geral se desconhece a distribuição de equilíbrio em problemas mais complexos e/ou em dimensões maiores. Algumas questões naturalmente surgem:

1. Como encontrar a matriz de transição P com o objetivo de simularmos a distribuição $\vec{\pi}$? Infelizmente não há uma resposta simples para esta pergunta. Não existe uma regra geral para uma escolha apropriada de P para uma nova situação particular.
2. Qual deve ser o valor de m (o número de passos ou tempos discretos) com o objetivo de se garantir a precisão desejada? Este problema é denominado de problema da taxa de convergência: com que rapidez a matriz P^m converge para a matriz estacionária S_{π} , (isto é, $P^m \rightarrow S_{\pi}$), ou para uma matriz “suficientemente” próxima¹¹ à matriz estacionária, dado um $\varepsilon > 0$?
3. Ao dividirmos a dinâmica dada por uma matriz de transição estocástica ou biestocástica em uma soma de duas contribuições, uma parte “transiente”, que converge exponencialmente para o estado de equilíbrio para tempos suficientemente grandes, e uma outra parte denominada de “regime permanente”, existem processos que atingem um ponto de máximo da complexidade estatística? Se existem tais processos discretos, este máximo ocorre durante o domínio da dinâmica transiente?

3.4.2.a CSCM para cadeias de Markov estocásticas em dimensão $N = 2$

O objetivo deste estudo é de compreendermos um pouco melhor o significado da quantidade CSCM, sem considerarmos todas as dificuldades técnicas de cada uma das suas aplicações já estudadas pela literatura. O Teo. 5 é um teorema muito simples e

¹⁰Uma cadeia de Markov é irreduzível e aperiódica se: *i.* as potências P^m da matriz de transição P convergem em componentes para uma matriz estocástica S_{π} na qual todas as colunas são iguais à distribuição estacionária $\vec{\pi}$. *ii.* só existe uma distribuição estacionária de equilíbrio, *cf.* [79]

¹¹Se existe uma matriz estocástica P^m de tal modo que, dado $\varepsilon > 0$, existe $\delta > 0$, tal que $\|P^m - S_{\pi}\|_{\star} < \delta$, para algum $m > 1$ e para alguma norma matricial qualquer \star .

pode ser encontrado na literatura demonstrado por meio de vários métodos diferentes (cf. [81, 85, 86]). Assim, nesta tese, escolhemos demonstrá-lo por indução, por simplicidade.

Teorema 5 (estado estacionário para cadeias de Markov com matrizes de transição estocásticas). *Seja a seguinte matriz $S_\pi = \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b & b \\ a & a \end{pmatrix}$, e seja $T(m) = \frac{(1-a-b)^m}{a+b} \begin{pmatrix} a & -b \\ -a & b \end{pmatrix}$. Em dimensão $N = 2$, dados possíveis estados $E = \{0, 1\}$, e dada matriz de transição estocástica $S = \begin{pmatrix} 1-a & b \\ a & 1-b \end{pmatrix}$, com: $0 < a + b < 2$, a matriz S^m é dada por:*

$$S^m = S_\pi + T(m) = \begin{pmatrix} 1-a & b \\ a & 1-b \end{pmatrix} = \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b & b \\ a & a \end{pmatrix} + \frac{(1-a-b)^m}{a+b} \begin{pmatrix} a & -b \\ -a & b \end{pmatrix}. \quad (3.34)$$

Desse modo, a distribuição de probabilidades estacionária, para $m \rightarrow \infty$, é dada por:

$$\vec{\pi} = \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}.$$

Prova: A demonstração se dará por indução e poderá ser vista no Apêndice A.2.

O Teo. 5 demonstra que a matriz estocástica S^m pode ser decomposta na soma de duas matrizes que são responsáveis pela dinâmica: $S^m = S_\pi + T(m)$, isto é, a matriz estocástica S^m pode ser decomposta em um termo constante de regime permanente (equilíbrio estacionário) S_π e em um outro termo $T(m)$, responsável pelo caráter transiente do processo estocástico. O estado estacionário é determinado pelos autovetores (idênticos) da matriz estacionária S_π , que é obtida realizando-se o limite $m \rightarrow \infty$ na decomposição mostrada pelo Teo. 5. Neste limite, $T_B(m \rightarrow \infty) \rightarrow \mathcal{O}(2)$, onde $\mathcal{O}(2)$ é a matriz nula (com todas as entradas iguais a zero), na dimensão $N = 2$, isto é, $\mathcal{O}_{ij} = 0$, para todo $i, j \in [1, 2]$.

Seja a matriz S^m dada pela Eq. 3.28. Dado um estado inicial, como, por exemplo, o vetor $\vec{p}_0 = (1, 0)^T$, o vetor no tempo discreto m será dado por $\vec{p}_{(m)} = S^m \vec{p}_0$. Logo, os elementos do vetor no tempo m serão dados por:

$$\vec{p}_{(m)} = S^m \vec{p}_0 = \begin{pmatrix} \frac{a(1-a-b)^m}{a+b} + \frac{b}{a+b} & \frac{b}{a+b} - \frac{(1-a-b)^m b}{a+b} \\ \frac{a}{a+b} - \frac{a(1-a-b)^m}{a+b} & \frac{a}{a+b} + \frac{(1-a-b)^m b}{a+b} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

$$\vec{p}_{(m)} = \begin{pmatrix} \left[\frac{b}{a+b} + \frac{a(1-a-b)^m}{a+b} \right] \\ \left[\frac{a}{a+b} - \frac{a(1-a-b)^m}{a+b} \right] \end{pmatrix}. \quad (3.36)$$

Seja $\vec{\pi}$ definido como o estado estacionário de uma cadeia de Markov com matriz de transição estocástica, tal como mostrado no Teo. 5, podemos observar claramente que $\|\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi}\|_1 = 2 \left| \frac{a(1-a-b)^m}{a+b} \right|$ e, com isso, podemos dizer que a dinâmica, para tempos suficientemente grandes, é dominada pela quantidade $|(1-a-b)^m|$, com $|1-a-b| < 1$ e, portanto, a distância l_1 , dada por $\|\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi}\|_1 \rightarrow 0$, converge exponencialmente para zero [87].

Seja a matriz de transição para uma cadeia de Markov de tempo discreto em um espaço de estados finito de dimensão N , no caso desta tese, $N = 2$. Denotemos os autovalores da matriz de transição S como β_1 e β_2 , de tal modo que $|\beta_1| > |\beta_2|$. O *gap* espectral absoluto da matriz é $1 - \beta_*$, (para $N = 2$, $\beta_* = \beta_2$). A cadeia converge para uma distribuição estacionária única $\vec{\pi}$ se, e somente se, $\beta_* < 1$ (cf. [88]).

Com o objetivo de separarmos a evolução temporal de um determinado estado em uma parte de dinâmica transiente e uma outra parte em regime permanente, devemos calcular o tempo de mistura. Dado um determinado $\varepsilon > 0$, haverá um tempo no qual a distância entre a m -ésima iteração do estado: $\vec{p}_{(m)} = S^m \vec{p}_0$ dista menos do que ε . Este tempo é dado na Def. 4 e estabelece o ponto de transição entre o regime transiente e o regime permanente.

Definição 4 (tempo de mistura). *Suponhamos $\beta_* < 1$, o tempo de mistura $t_{mix}(\varepsilon)$ para um determinado parâmetro ε pode ser definido como $t_{mix}(\varepsilon) = \min\{m \geq 0 : \|\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi}\|_1 \leq \varepsilon\}$.*

Proposição 1 (tempo de mistura [88]). *Seja uma cadeia de Markov finita, reversível e aperiódica, de tal modo que $\min\{\vec{p}_{(m)}\} > 0$. Seja: $\alpha = \sqrt{\beta_2(S^T S)}$, i.e., α é definido como a raiz quadrada do segundo menor autovalor, (β_2), de $S^T S$ e seja $\pi_{min} = \min\{\pi(x_i)\}$, com $\pi_{min} > 0$. Para todo $0 < \varepsilon < 1$, o tempo de mistura $t_{mix}(\varepsilon) \in [t_{mix}^{min}, t_{mix}^{max}]$ está dentro destes limites:*

$$t_{mix}^{min} = \log(2\varepsilon)^{-1} \left[\frac{1}{1-\alpha} - 1 \right] \leq t_{mix}(\varepsilon) \leq \left[\frac{1}{1-\alpha} \log \left(\frac{1}{2\varepsilon\sqrt{\pi_{min}}} \right) \right] = t_{mix}^{max}. \quad (3.37)$$

$$t_{mix}(\varepsilon) = \text{nint}([t_{mix}^{min}, t_{mix}^{max}]). \quad (3.38)$$

Onde $\text{nint}(\star)$ significa uma função que arredonda o seu argumento para o inteiro mais próximo.

Prova: As provas para o limite inferior e superior do tempo de mistura estão fora do objetivo e do escopo desta tese e podem ser encontradas nas Refs. [88–91].

O tempo de mistura indica o ponto de transição do regime transiente para o permanente (para algum valor de ε fixo) para a cadeia de Markov descrita pela matriz estocástica S . Note que este tempo independe do estado inicial da dinâmica. Ainda que a ação da matriz transiente $T(m)$ ainda possa ser detectada, $\|\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi}\|_1 \leq \varepsilon$, para algum $0 < \varepsilon \ll 1$. A distância do m -ésimo vetor de probabilidades simulado $\vec{p}_{(m)}$ ao estado de equilíbrio $\vec{\pi}$ decresce exponencialmente, isto é, $\lim_{m \rightarrow \infty} \|\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi}\|_1 \propto \lim_{m \rightarrow \infty} (1 - a - b)^m \rightarrow 0$, se $0 < a + b < 2$.

A Fig. 1 mostra o comportamento da medida de complexidade estatística clássica (CSCM), dada por $\mathcal{C}(\vec{p}_{(m)}) = H(\vec{p}_{(m)}) \cdot D(\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi})$, em azul, para uma cadeia de Markov estocástica discreta, $\vec{p}_{(m)} = S^m \vec{p}_0$, com $\vec{p}_0 = (1, 0)^T$, para a matriz estocástica S definida conforme a Eq. 3.27, com $a = 0.16$ e $b = 0.01$, e com tempo discreto: $1 \leq m \leq 25$. A evolução temporal das funções entropia de Shannon $H(\vec{p}_{(m)})$, em vermelho, e a função de equilíbrio

$D(\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi})$, em amarelo, também são representadas para estes tempos discretos. A reta horizontal é assíntota da entropia de Shannon, porque $H(\vec{p}_{(m)}) \rightarrow H(\vec{\pi}) = 0.2337$, quando $m \rightarrow \infty$ e $\vec{p}_{(m)} \rightarrow \vec{\pi} = (\frac{b}{a+b}, \frac{a}{a+b})^T \approx (0.058824, 0.941176)^T$.

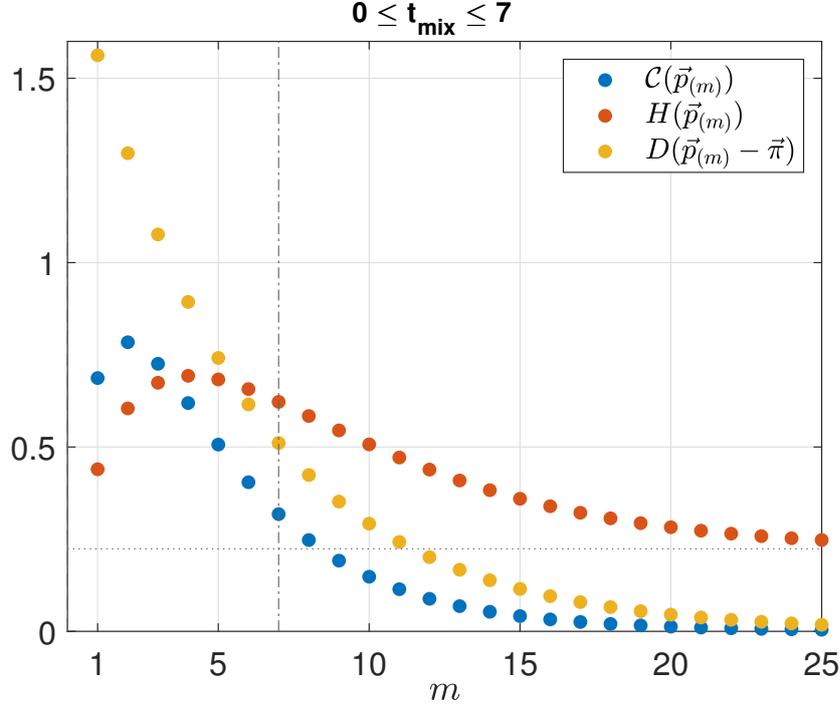


Figura 1 – Medida de complexidade estatística clássica para uma cadeia de Markov estocástica $\mathcal{C}(\vec{p}_{(m)})$, (CSCM), em azul; entropia de Shannon $H(\vec{p}_{(m)})$, em vermelho; $D(\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi})$, em amarelo, para uma matriz S com $a = 0.16$ e $b = 0.01$, em função dos tempos discretos $1 \leq m \leq 25$. O tempo de mistura está dentro do intervalo $0 \leq t_{mix} \leq 7$, para $\varepsilon = \frac{1}{100}$, com $t_{mix}^{max} = 7$, reta vertical traço-ponto. A reta horizontal pontilhada indica: $H(\vec{\pi}) = 0.2237$.

A Fig. 1 indica que o máximo de complexidade estatística ocorre durante a dinâmica transiente, governada pelo efeito da matriz transiente $T(m)$. Esta dinâmica é dominada pela região onde a entropia de Shannon atinge o ponto de máximo. A entropia de Shannon cresce com uma taxa mais elevada neste intervalo do que a função de equilíbrio decresce, apesar de que ambas as funções, de equilíbrio e entropia de Shannon, converjam exponencialmente para tempos grandes. A função de equilíbrio $D(\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi}) \rightarrow 0$, enquanto a entropia de Shannon converge para $H(\vec{p}_{(m)}) \rightarrow H(\vec{\pi}) = 0.2237$. Para tempos suficientemente grandes, $\mathcal{C}(\vec{p}_{(m)}) \rightarrow 0$, devido ao fato da função de equilíbrio dominar a dinâmica para estes tempos.

A Fig. 2 ilustra o módulo e as direções dos m -ésimos vetores da evolução temporal de $\vec{p}_{(m)} = S^m \vec{p}_0$, com vetor inicial $\vec{p}_0 = (1, 0)^T$, para uma cadeia de Markov definida por meio da matriz estocástica S^m , (escrita como na Eq. 3.28), para valores de a pertencentes ao intervalo $a = [0.04, 0.5]$, com $\Delta a = 0.02$ e $b = 0.01$, para tempos discretos $1 \leq m \leq 25$. O comportamento da norma euclidiana l_2 dos vetores $\|\vec{p}_{(m)}\|_2$ está ilustrada na barra de cores.

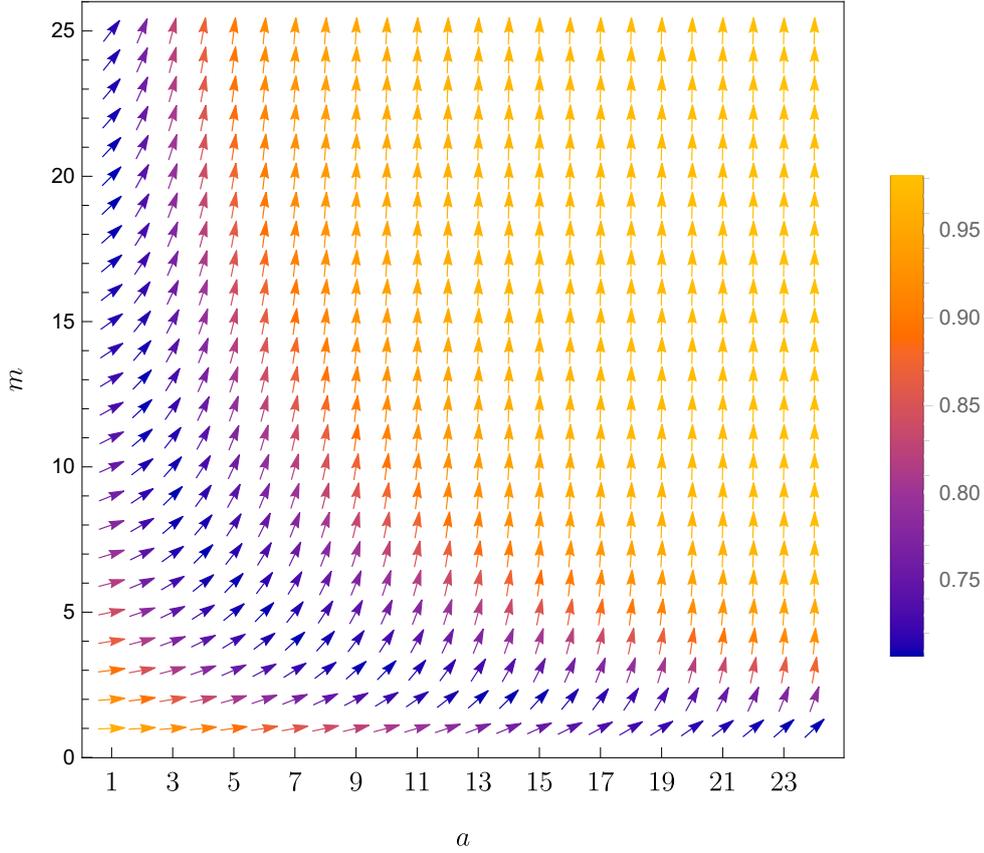


Figura 2 – Representação dos vetores $\vec{p}^{(m)} = S^m \vec{p}_0$, para os tempos discretos $1 \leq m \leq 25$, com vetor inicial $\vec{p}_0 = (1, 0)^T$, em função de $a(k)$, com $k = 1, \dots, 24$, para uma cadeia de Markov com matrizes estocásticas definidas por $a = [0.04, 0.5]$, com $\Delta a = 0.02$ e $b = 0.01$. As normas l_2 dos vetores $\|\vec{p}^{(m)}\|_2$ estão ilustradas na barra de cores.

A dinâmica mostrada na Fig. 1, para $a = 0.16$ e $b = 0.01$, está ilustrada na Fig. 2, na sétima coluna vertical, (*i.e.*, a coluna de número 7), devido ao fato de no eixo horizontal estarem representados os valores de a de tal modo que $a(k) = 0.04 + 0.02(k - 1)$, para os números representados no eixo horizontal: $k = 1, 2, 3, \dots, 24$, (somente os números ímpares foram indicados no eixo horizontal da Fig. 2). Nessa figura, observamos que o comportamento do máximo da CSCM exibido na Fig. 1 durante a dinâmica transiente pôde ser captado e observado na taxa de variação nas direções dos vetores $\vec{p}^{(m)}$, além da mudança nas suas normas l_2 . É importante notar que, ainda que as normas l_1 de todos os vetores sejam iguais a 1, isto é, $\|\vec{p}^{(m)}\|_1 = 1$, a norma que mede uma espécie de “pureza” dos vetores, a norma l_2 , isto é, $\|\vec{p}^{(m)}\|_2$, varia. A parte azul/roxa da Fig. 2 corresponde à diminuição da pureza durante a dinâmica transiente, o que corresponde a um aumento da grandeza CSCM, na escala de ordem e desordem. Observamos também a dinâmica estacionária, que ocorre em regime permanente, acontece quando os vetores convergem para $\vec{\pi}(a) = \left(\frac{0.01}{a+0.01}, \frac{a}{a+0.01}\right)^T$, no caso de $k = 7$ e $a(k = 7) = 0.16$, temos: $\vec{\pi}(0.16) = (0.058824, 0.941176)^T$. É interessante observarmos que as convergências, tanto

nos módulos dos vetores quanto nas suas direções acontecem na parte estacionária da dinâmica (após o tempo de mistura máximo).

Esse fato ocorre devido à modulação que a entropia de Shannon realiza na função de equilíbrio (a distância euclidiana entre o m -ésimo vetor e o vetor estacionário), que é sempre monotonicamente decrescente. Esse comportamento da entropia é transmitido para a CSCM. Entretanto, o comportamento do produto entre entropia e a função de equilíbrio aparentemente explica melhor o comportamento da dinâmica nas regiões em azul/roxo da Fig. 2, devido ao fato de os máximos da entropia de Shannon ocorrerem aproximadamente no início dessas regiões entre o tempo de mistura mínimo e o tempo de mistura máximo. Nessas regiões, não somente há um decréscimo na pureza do vetor e , conseqüentemente, um aumento na entropia de Shannon, mas também há um aumento na taxa de variação das direções dos m -ésimos vetores, que irão convergir para o vetor estacionário $\vec{\pi}$, durante a dinâmica transiente.

3.4.2.b CSCM para cadeias de Markov biestocásticas em dimensão $N = 2$

Nesta seção, iremos calcular a CSCM para cadeias de Markov biestocásticas em dimensão $N = 2$. De maneira semelhante ao realizado no Teo. 5, nesta tese, iremos demonstrar o Teo. 6 por meio de indução. Este teorema pode ser encontrado na literatura demonstrado por meio de vários métodos diferentes (*cf.* [81, 85, 86]).

Teorema 6 (estado estacionário para cadeias de Markov com matrizes de transição biestocásticas). *Seja a seguinte matriz $B_\pi = \frac{1}{2a} \begin{pmatrix} a & a \\ a & a \end{pmatrix}$, e seja também a matriz dada por $T_B(m) = \frac{(1-2a)^m}{2a} \begin{pmatrix} a & -a \\ -a & a \end{pmatrix}$. Em dimensão $N = 2$, dados possíveis estados $E = \{0, 1\}$, e dada matriz de transição biestocástica $B = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ a & 1-a \end{pmatrix}$, com: $0 < a < 1$, a matriz B^m é dada por:*

$$B^m = B_\pi + T_B(m) = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ a & 1-a \end{pmatrix} = \frac{1}{2a} \begin{pmatrix} a & a \\ a & a \end{pmatrix} + \frac{(1-2a)^m}{2a} \begin{pmatrix} a & -a \\ -a & a \end{pmatrix}. \quad (3.39)$$

Desse modo, a distribuição de probabilidades estacionária, para $m \rightarrow \infty$, é dada por: $\vec{\pi} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})^T$.

Prova: A prova se dará por meio de indução e poderá ser vista no Apêndice A.2.

Do mesmo modo do que já foi discutido pelo Teo. 5, o Teo. 6 demonstra que a matriz biestocástica B^m pode ser decomposta na soma de duas matrizes que são responsáveis pela dinâmica: $B^m = B_\pi + T_B(m)$, isto é, a matriz biestocástica B^m pode ser decomposta em um termo constante de regime permanente (equilíbrio estacionário) B_π e em um outro

termo $T_B(m)$, responsável pelo caráter transiente do processo biestocástico. O estado estacionário é determinado pelos autovetores (idênticos) da matriz estacionária B_π , que é obtida realizando-se o limite $m \rightarrow \infty$ na decomposição mostrada pelo Teo. 6. Neste limite, $T_B(m \rightarrow \infty) \rightarrow \mathcal{O}(2)$, onde $\mathcal{O}(2)$ é a matriz nula (com todas as entradas iguais a zero), na dimensão $N = 2$, isto é, $\mathcal{O}_{ij} = 0$, para todo $i, j \in [1, 2]$.

Seja a matriz B^m dada pela Eq. 3.30. Dado um estado inicial, como, por exemplo, o vetor $\vec{p}_0 = (1, 0)^T$, o vetor no tempo discreto m será dado por $\vec{p}_{(m)} = B^m \vec{p}_0$. Logo, os elementos do vetor no tempo m serão dados por:

$$\vec{p}_{(m)} = B^m \vec{p}_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1-2a)^m & \frac{1}{2} - \frac{1}{2}(1-2a)^m \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2}(1-2a)^m & \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1-2a)^m \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.40)$$

$$\vec{p}_{(m)} = \begin{pmatrix} [\frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1-2a)^m] \\ [\frac{1}{2} - \frac{1}{2}(1-2a)^m] \end{pmatrix}. \quad (3.41)$$

Novamente, podemos observar que: $\|\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi}\|_1 = |(1-2a)^m|$ e, com isso, podemos dizer que a dinâmica, para tempos suficientemente grandes, é dominada pela quantidade $|(1-2a)^m|$, com $|1-2a| < 1$ e, portanto, a distância l_1 dada por $\|\vec{p}_{(m)} - \vec{\pi}\|_1 \rightarrow 0$, converge exponencialmente para zero [87].

A Fig. 3 representa um exemplo de dinâmica comandado pela matriz biestocástica B , definida por $a = 0.05$, em função dos tempos discretos $1 \leq m \leq 30$. Similarmente como ocorreu com o processo regido pela matriz estocástica S (mostrado na Fig. 1) a Fig. 3 indica que o máximo de complexidade estatística ocorre durante a dinâmica transiente, governada pelo efeito da matriz transiente $T_B(m)$.

Esta dinâmica é dominada pela região onde a entropia de Shannon cresce monotonicamente. Similarmente à dinâmica descrita por uma matriz de transição estocástica, a dinâmica descrita pela matriz biestocástica B é dominada, para pequenos tempos, pela entropia de Shannon. Inicialmente, durante o regime transiente, a entropia de Shannon cresce com uma taxa superior à taxa em que a função de equilíbrio decresce, ainda que ambas as funções (de equilíbrio e a entropia de Shannon) convirjam exponencialmente para zero, para tempos suficientemente grandes. A função de equilíbrio $D(\vec{p}_{(m)} - \vec{\mathcal{I}}) \rightarrow 0$, com $\vec{\mathcal{I}} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})^T$, enquanto a entropia de Shannon converge para $H(\vec{p}_{(m)}) \rightarrow H(\vec{\mathcal{I}}) = \ln(2) \approx 0.693$. Para tempos suficientemente grandes, $\mathcal{C}(\vec{p}_{(m)}) \rightarrow 0$, devido ao fato da função de equilíbrio dominar a dinâmica para estes tempos.

A Fig. 4 representa os módulos e as direções dos vetores da evolução temporal $\vec{p}_{(m)} = B^m \vec{p}_0$, com vetor inicial $\vec{p}_0 = (1, 0)^T$, para uma cadeia de Markov definida por meio da matriz biestocástica: B^m , escrita como na Eq. 3.30, para a pertencente ao intervalo $a = [0.02, 0.2]$, com $\Delta a = 0.01$, para os tempos discretos $1 \leq m \leq 19$. O comportamento da norma euclidiana l_2 dos vetores $\|\vec{p}_{(m)}\|_2$ está ilustrada na barra de cores.

A dinâmica mostrada na Fig. 3, para $a = 0.05$, está ilustrada na Fig. 4, na quarta

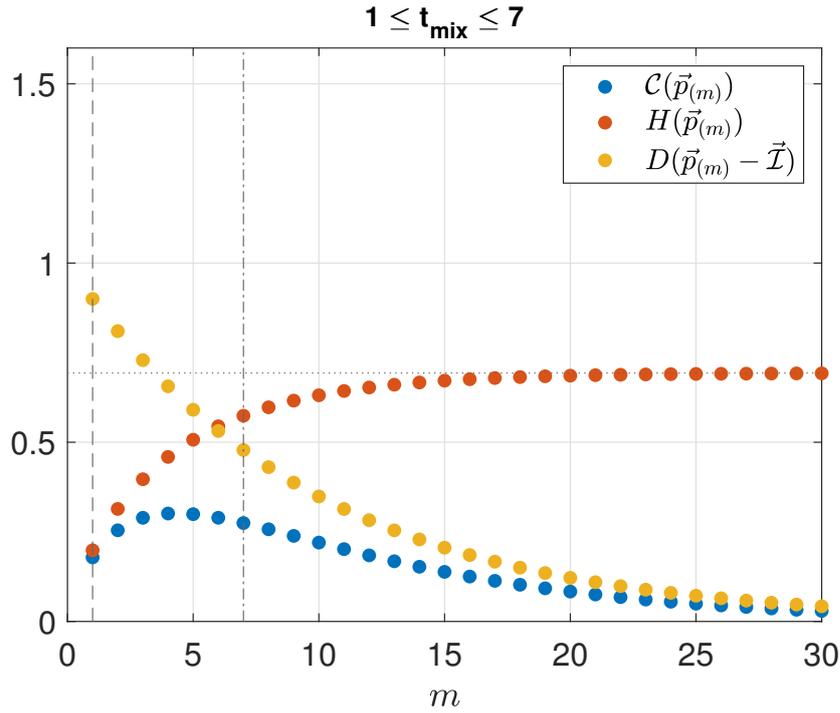


Figura 3 – Medida de complexidade estatística clássica para uma cadeia de Markov biestocástica $\mathcal{C}(\vec{p}_{(m)})$, (CSCM), em azul; entropia de Shannon $H(\vec{p}_{(m)})$, em vermelho; $D(\vec{p}_{(m)} - \vec{I})$, em amarelo, para uma matriz B com $a = 0.05$, em função dos tempos discretos $1 \leq m \leq 30$. O tempo de mistura está dentro do intervalo $1 \leq t_{mix} \leq 7$, para $\varepsilon = \frac{1}{100}$, com $t_{mix}^{max} = 7$ (reta vertical traço-ponto). A reta horizontal pontilhada indica $H(\vec{I}) = \log(2) \approx 0.693$.

coluna vertical, (*i.e.*, a coluna de número 4), devido ao fato de no eixo horizontal estarem representados os valores de a de tal modo que $a(k) = 0.02 + 0.01(k - 1)$, para os números representados no eixo horizontal: $k = 1, 2, 3, \dots, 19$ (somente os números pares foram indicados no eixo horizontal da Fig. 4). Nessa figura, observamos que o comportamento da CSCM exibido na Fig. 3 durante a dinâmica transiente pôde ser captado e observado na mudança da direção dos vetores $\vec{p}_{(m)}$, além da mudança nas suas normas l_2 .

É importante notar que, ainda que as normas l_1 de todos os vetores sejam iguais a 1, isto é, $\|\vec{p}_{(m)}\|_1 = 1$, a norma que mede uma espécie de “pureza” dos vetores, a norma l_2 , isto é, a norma $\|\vec{p}_{(m)}\|_2$ varia. A parte laranja/vermelha da Fig. 4 corresponde à diminuição da pureza durante a dinâmica transiente, o que corresponde à convergência da grandeza CSCM, na escala de ordem e desordem, porque $\mathcal{C}(\vec{\pi}) = 0$. Observamos, também, a dinâmica estacionária, que ocorre em regime permanente, acontece quando os vetores convergem para $\vec{\pi} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})^T$. É interessante observarmos que a convergência, tanto na pureza dos vetores quanto nas suas direções, se realiza na parte estacionária da dinâmica.

De maneira análoga aos resultados obtidos para a dinâmica *via* matriz estocástica S , para a dinâmica biestocástica, regida pela matriz B , o comportamento do produto

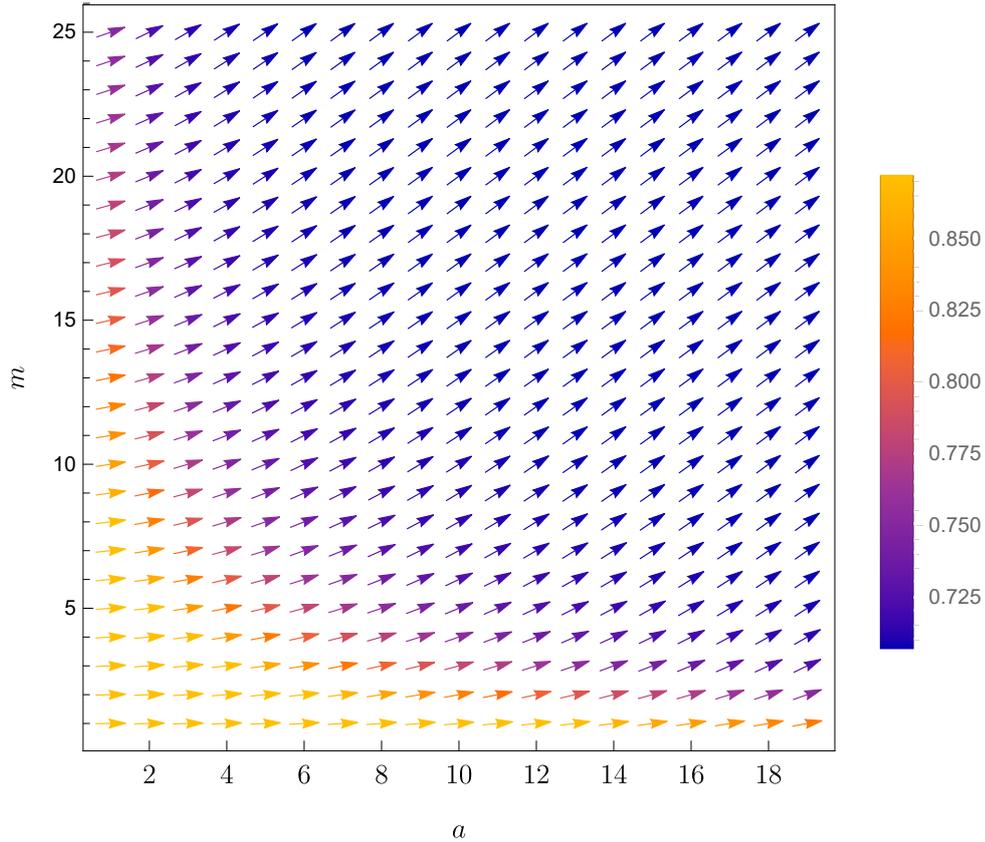


Figura 4 – Representação dos vetores $\vec{p}_{(m)} = B^m \vec{p}_0$, para os tempos discretos $1 \leq m \leq 19$, com vetor inicial $\vec{p}_0 = (1, 0)^T$, em função de $a(k)$, para $k = 1, \dots, 19$, para uma cadeia de Markov com matrizes biestocásticas definidas por $a = [0.02, 0.2]$, com $\Delta a = 0.01$. As normas l_2 dos vetores $\|\vec{p}_{(m)}\|_2$ estão ilustradas na barra de cores.

entre entropia e a função de desequilíbrio aparentemente explica melhor o comportamento da dinâmica nas regiões em laranja/vermelho da Fig. 4, devido ao fato de os máximos da entropia de Shannon ocorrerem aproximadamente no início dessas regiões entre o tempo de mistura mínimo e o tempo de mistura máximo. Nessas regiões, não somente há um decrescimento na pureza do vetor e, conseqüentemente, um aumento na entropia de Shannon, mas também há uma taxa maior na variação as direções dos m -ésimos vetores, que irão convergir para o vetor estacionário $\vec{\pi}$, durante a dinâmica transiente.

3.5 Revisão de algumas famílias de medidas de complexidade

A existência desta seção se justifica por completeza. Nela, discorreremos sobre duas famílias de medidas de complexidade que são contraditórias na literatura. Devido ao fato da simples mudança da função de desequilíbrio gerar uma “nova” função de complexidade estatística, cada uma dessas famílias terá propriedades, resultados e exemplos interessantes para serem discutidos. Para uma revisão bibliográfica completa sobre o assunto, veja a Ref. [56].

3.5.1 Medida de complexidade de Shiner–Davison–Landsberg

Baseado em noções adequadamente definidas de ordem e desordem, fundamentos estes que possuem um grau significativo de flexibilidade, Shiner, Davison e Landsberg apresentaram em [10] uma medida de complexidade denominada de medida de complexidade de Shiner, Davison e Landsberg (SDL). Essa medida foi duramente criticada nas Refs. [92, 93]. Ela foi definida por meio da função quantificadora de “desordem” como a entropia de Shannon normalizada $\Delta = H/H_{max}$ e a função que mediria o “grau de ordem” como $\Omega = (1 - \Delta)$. Portanto, eles definiram:

$$\mathcal{C}_{\alpha\beta}^{SDL} = \Delta^\alpha(1 - \Delta)^\beta. \quad (3.42)$$

Onde α é o “grau de força” da desordem e β é o “grau de força” da ordem. Se a distribuição de probabilidades possui um máximo local, é possível realizar uma expansão em série de Taylor de Ω , em torno do seu ponto de máximo, em uma dimensão fixa N e, localmente $\mathcal{C} \approx \mathcal{C}_{11}^{SDL}$, isto é, que $\mathcal{C}_{11}^{SDL} \rightarrow \text{CSCM}$, perto do seu ponto de máximo [10], para $\alpha = \beta = 1$. A grande crítica levantada¹² nas Refs. [92, 93] consiste no fato de que $\mathcal{C}_{\alpha\beta}^{SDL}$ é uma função demasiadamente simples da entropia. Como consequência, pode não conter novas informações *vis à vis* à medida de ordem [7, 95].

3.5.1.a Aplicações para a CSCM definida por meio da complexidade SDL

Ambas as medidas de complexidade (tanto a medida SDL quanto a CSCM, definida por LMC) foram aplicadas ao caso de uma distribuição binomial, de probabilidade p e em n experimentos independentes (de Bernoulli), dada por $p(i) = \binom{N}{i} p^i (1-p)^{N-i}$, com o objetivo de determinar como o comprimento do conjunto de dados implica o máximo e o mínimo do valor da complexidade estatística e como a probabilidade de sucesso das tentativas repetidas determina o quão estatisticamente complexo é todo o conjunto [96].

Os valores máximos para ambas as medidas ocorrem em probabilidades desbalanceadas ($p \neq 1/2$) e o seu valor é próximo a 0.25 para a SDL e aproximadamente 0.15 para a CSCM, definida por LMC. Por fim, pode-se dizer que a complexidade, medida por LMC ou SDL, não aumenta com o número de experimentos sucessivos, se eles forem independentes. Para aumentar a complexidade, os ensaios devem ser relacionados. Além disso, probabilidades desequilibradas são uma importante fonte de complexidade [96].

3.5.2 Medida de complexidade baseada na distância de Wootters

O conceito de distância estatística de Wootters se origina no contexto da mecânica quântica. Usa-se principalmente para distinguir entre diferentes preparações de um dado estado quântico e, de forma mais geral, para verificar até que ponto dois desses estados

¹²E respondida em [94].

diferem um do outro [7]. Se considerarmos, por exemplo, apenas preparações de estados puros, que podem ser representados por raios em um espaço de Hilbert adequado, a questão é, portanto: Qual é a distância estatística entre dois raios diferentes neste espaço [97]? Apesar da origem não-clássica, as considerações de Wootters são de natureza puramente estatística e, portanto, podem ser utilizadas em um espaço de probabilidades qualquer $\Theta(N)$. Em dimensão $N = 2$, baseado na incerteza-padrão (ou desvio padrão) em um conjunto grande de n medidas, $\Delta p = \sqrt{\frac{\text{var}(X)}{n}} = \sqrt{\frac{E(X^2) - E(X)^2}{n}} = \sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}$. O objetivo inicial implícito a essa concepção de distância é levar em conta as flutuações estatísticas intrínsecas a todas as amostras finitas. Ao considerarmos estes desvios estatísticos associados, as frequências diferem ligeiramente das probabilidades “reais” e duas preparações serão indistinguíveis em um determinado número n de tentativas, se a diferença entre as probabilidades reais for inferior ao tamanho de uma flutuação típica característica [7]. Desse modo, definimos em primeiro lugar a “região de incerteza” em torno de um ponto \vec{P} . Esta zona é composta por todos os pontos $\vec{\xi}$ tais que o expoente na Eq. 3.43 é, em valor absoluto, menor¹³ que $1/2$.

$$\rho(\vec{\xi}) \propto \exp \left[-\frac{n}{2} \sum_{i=1}^N \frac{(\xi_i - p_i)^2}{p_i} \right]. \quad (3.43)$$

Mais especificamente, $\{\xi_i\}$ é o conjunto de resultados (após n tentativas) associado a um determinado conjunto de probabilidades $\{p_i\}$ e ρ é uma densidade de probabilidade. Este conjunto é distribuído conforme uma distribuição multinomial, que obviamente será aproximada pela gaussiana da Eq. 3.43, quando n for suficientemente grande. Assim, dois pontos P_1 e P_2 , pertencentes ao espaço de probabilidades, podem ser denominados “distinguíveis” em n tentativas se suas regiões de incerteza não se sobrepuserem.

Para compreendermos melhor o conceito de distância estatística, suponhamos um experimento de óptica clássica com fótons e filtros polarizadores. Imagine-se um feixe de fótons preparado por um filtro polarizador e analisado por um prisma de Nicol [98]. Cada um dos fótons, quando passa pelo prisma, possui exatamente duas opções: passar diretamente pelo prisma (chamemos esse resultado de “sim”) ou ser desviado em uma direção específica (resultado “não”). Suponhamos que a orientação do prisma de Nicol seja fixada de uma vez por todas de tal forma que fótons polarizados verticalmente sempre passam direto. Ao contarmos as frequências de contagem, iremos obter a probabilidade $p(\text{sim}) = \cos^2(\theta)$, quando estivermos no limite do número de fótons n muito grande.

Desse modo, a distância estatística entre duas orientações θ_1 e θ_2 , dada por $d(\theta_1, \theta_2)$ neste caso, se confunde com a distância $|\theta_1 - \theta_2|$. Para determiná-la definimos o seguinte limite $d(\theta_1, \theta_2) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{n}} \times [\text{Número de orientações intermediárias distinguíveis em } n \text{ tentativas}]$, em que o fator $1/\sqrt{n}$ foi incluído para que o limite exista, já que o número

¹³Para a dimensão $N = 2$ a escolha do limite $1/2$ é óbvio, entretanto para dimensões maiores pode-se escolher outros limites.

de estados distinguíveis cresce com \sqrt{n} . Podemos associar uma região de incerteza que se estende de: $\theta - \Delta\theta$ até $\theta + \Delta\theta$. Portanto, $\Delta\theta = \frac{d\theta}{dp}\Delta p = \frac{d\theta}{dp} \left[\frac{p(1-p)}{n} \right]^{1/2}$. Se assumimos $\theta_1 < \theta_2$, sem perda de generalidade, teremos:

$$d(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{\sqrt{n}} \int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{d\theta}{2\Delta\theta} = \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \frac{dp/d\theta}{2[p(1-p)]^{1/2}}. \quad (3.44)$$

Substituindo-se $p(\theta) = \cos^2(\theta)$ na Eq. 3.44, obtemos a distância estatística como a distância entre as duas orientações: $d(\theta_1, \theta_2) = \theta_2 - \theta_1$. De maneira análoga à discussão anterior, podemos definir uma distância entre dois estados de um espaço de probabilidades $d(p_1, p_2)$ na Eq. 3.45:

$$d(p_1, p_2) = \int_{p_1}^{p_2} \frac{dp}{2[p(1-p)]^{1/2}}. \quad (3.45)$$

A integral dada pela Eq. 3.45 pode ser resolvida por meio da substituição $u = \sqrt{1-p}$, portanto, $du = \frac{-dp}{2\sqrt{1-p}}$. Dessa forma, a integral dada pela Eq. 3.45 pode ser escrita como: $\int \frac{-du}{\sqrt{1-u^2}} = \arccos(\sqrt{p})$.

Considere uma curva suave parametrizada pelo parâmetro t em um espaço de probabilidades que ligue dois pontos $p(0) = P_1$ e $p(1) = P_2$. Seja $p(t)$ um vetor de probabilidades, parametrizado por $t \in [0, 1]$. O comprimento ℓ estatístico (no espaço de probabilidade) desta curva é dado pela Eq. 3.46

$$\ell = \frac{1}{2} \int_0^1 dt \left\{ \sum_{i=1}^N \frac{1}{p_i} \left[\frac{dp_i(t)}{dt} \right]^2 \right\}^{1/2}. \quad (3.46)$$

Com a mudança de variáveis $x_i = p_i^{1/2}$, com $dx_i = \frac{1}{2} p_i^{-1/2} dp_i$,

$$\ell = \int_0^1 dt \left\{ \sum_{i=1}^N \left[\frac{dx_i(t)}{dt} \right]^2 \right\}^{1/2}. \quad (3.47)$$

A Eq. 3.47 significa o comprimento euclidiano normal no espaço x transformado. O requerimento que a curva $p(t) \in \mathbb{R}^N$, é $1 = \sum_{i=1}^N p_i = \sum_{i=1}^N x_i^2$. Portanto, a curva deve estar sobre uma esfera unitária neste espaço transformado. A métrica acima induz imediatamente uma métrica no espaço de parâmetros. À medida que se move de um ponto θ para um ponto $\theta + d\theta$ no espaço dos parâmetros (no exemplo abaixo, esse espaço será definido pela direção da polarização dos fótons), as probabilidades associadas a esses parâmetros muda de $p(\theta)$ para $p(\theta) + \sum_j \frac{\partial p}{\partial \theta_j} d\theta_j$, onde os θ_j são as coordenadas no espaço de parâmetros. A distância percorrida no espaço de probabilidade é, portanto, dada pela Eq. 3.48

$$d\ell^2 = \sum_i \frac{(dp_i)^2}{p_i} = \sum_i \sum_{j,k} \frac{1}{p_i} \frac{\partial p_i}{\partial \theta_j} \frac{\partial p_i}{\partial \theta_k} d\theta_j d\theta_k = \sum_i \sum_{j,k} g_{jk} d\theta_j d\theta_k, \quad (3.48)$$

com

$$g_{jk} = \sum_i \sum_{j,k} \frac{1}{p_i} \frac{\partial p_i}{\partial \theta_j} \frac{\partial p_i}{\partial \theta_k}, \quad (3.49)$$

definido como o tensor métrico que induz a distância estatística entre dois estados no espaço de parâmetros. De certa forma, essa métrica significa a noção mais natural de distância no espaço de parâmetros, pois leva em conta a dificuldade de se distinguir diferentes estados. O tensor métrico g_{jk} é idêntico a uma matriz familiar da teoria estatística, a saber, a “matriz de informação de Fisher¹⁴ (dada por $\mathcal{I}(\theta)$),” introduzida por R. Fisher em conexão com a teoria da inferência.

Exemplo: (Ref. [99]). O tipo mais simples de experimento probabilístico é aquele com apenas dois resultados possíveis. Um exemplo de tal experimento consiste na análise da polarização de um fóton por meio de um prisma de Nicol, ou outro dispositivo semelhante, conforme dito anteriormente. Se um feixe polarizado de fótons for analisado dessa forma, cada fóton, ao encontrar o prisma, seguirá um dos dois caminhos possíveis e pousará em um dos dois detectores, que correspondem às duas polarizações ortogonais “vertical” e “horizontal”. Neste exemplo, o espaço de parâmetros consiste em um ângulo θ medido entre $\theta \in [0, 2\pi]$. A partir do nosso conhecimento da probabilidade $p(\theta)$, podemos calcular a distância estatística entre θ e $\theta + d\theta$, por meio da Eq. 3.48. Seja a probabilidade de o fóton estar polarizado na vertical dada como $p_v = \cos^2(\theta)$. Portanto, a probabilidade de o fóton estar polarizado na horizontal será igual a $p_h = 1 - p_v = \sin^2(\theta)$. Assim, a distância entre este dois estados será:

$$d\ell = \left\{ \frac{1}{\cos^2(\theta)} \left[\frac{d}{d\theta} \cos^2(\theta) \right]^2 + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \left[\frac{d}{d\theta} \sin^2(\theta) \right]^2 \right\}^{1/2} d\theta = 2d\theta. \quad (3.50)$$

Assim, a distância estatística entre dois estados de polarização, ou seja, o número de polarizações distinguíveis intermediárias, é proporcional ao ângulo entre elas. Portanto, no caso de polarização de fótons, a distância no espaço de parâmetros (distância entre diferentes polarizações) é proporcional à distância no espaço de probabilidades.

Sabendo-se que a Eq. 3.47 significa o comprimento euclidiano usual no espaço x transformado, a métrica acima induz imediatamente uma métrica no espaço de probabilidades. A menor distância estatística entre os vetores X_1 e X_2 no espaço de x é denominada de distância de Wootters D_W e consiste no ângulo entre os vetores¹⁵

¹⁴Essa matriz pode ser derivada como o Hessiano da entropia relativa. Ele pode ser usado como uma métrica Riemanniana para definir a métrica de Fisher-Rao nos casos de ser positiva-definida. Ela também pode ser entendida como uma métrica induzida a partir da métrica euclidiana, após a devida mudança de variável. No caso quântico, para estados puros (em sua forma complexa), esta métrica é denominada de métrica de Fubini–Study. A informação de Fisher em $1D$ consiste no seguinte valor esperado: $[\mathcal{I}(\theta)] = \mathbb{E} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \theta} \log f(x; \theta) \right)^2 \middle| x \right] = \int_{x \in D} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \log f(x; \theta) \right]^2 f(x; \theta) dx$.

¹⁵A noção intuitiva de que o ângulo entre dois vetores normalizados \vec{u} e \vec{v} é dado por $\theta = \arccos(\vec{u} \cdot \vec{v})$ é útil neste momento.

$\vec{P}^{1/2} = (p_1^{1/2}, p_2^{1/2}, \dots, p_N^{1/2})^T$ e $\vec{Q}^{1/2} = (q_1^{1/2}, q_2^{1/2}, \dots, q_N^{1/2})^T$, o arco-cosseno do produto escalar entre os vetores, dado pela Eq. 3.51.

$$D_W(\vec{P}, \vec{Q}) = \arccos \left\{ \sum_{i=1}^N (p_i)^{1/2} \cdot (q_i)^{1/2} \right\}. \quad (3.51)$$

O valor da distância $D_W = 0$, quando as distribuições coincidem e o valor de D_W será máximo, caso os vetores sejam ortogonais. Inspirado nesta distância mostrada na Eq. 3.51, os autores na Ref. [7] reescreveram as funções de ordem e desordem e definiram uma medida de complexidade baseada na distância de Wootters entre o vetor distribuição de probabilidades dado por \vec{P} e o vetor uniforme, dado por $\vec{\mathcal{I}}$ é:

$$D_W(\vec{P}, \vec{\mathcal{I}}) = \frac{\arccos \left\{ \sum_{i=1}^N [p_i^{(1)}]^{1/2} \cdot [1/N]^{1/2} \right\}}{\arccos[(1/N)^{1/2}]}. \quad (3.52)$$

3.5.2.a Aplicações para a CSCM definida por meio da distância de Wootters

Mapa logístico

Como exemplo de aplicação da medida de complexidade estatística clássica (CSCM) definida como $\mathcal{C} = H \cdot D_W(\vec{P}, \vec{\mathcal{I}})$, isto é, com a distância de Wootters no papel da função de desequilíbrio, autores em [7] estudaram o mapa logístico clássico: $x_{n+1} = rx_x(1 - x_n)$, que possui dinâmica controlada pelo parâmetro r , para $0 \leq x_n \leq 1$ e $0 < r \leq 4$, com o objetivo de comparar a CSCM com duas funções diferentes quantificadoras do grau de “ordem”. O estudo comparou CSCM construída com a norma euclidiana l_2 , (Eq. 3.8), isto é, $\mathcal{C} = H \cdot D_2(\vec{P}, \vec{\mathcal{I}})$ com a CSCM baseada na Eq. 3.52, *i.e.*, com a distância de Wootters como função desequilíbrio. Eles obtiveram o início do caos na vizinhança de $r_\infty \approx 3.569946$, região onde o primeiro expoente de Lyapunov (λ) torna-se positivo, o que reflete a divergência exponencial das trajetórias no espaço de Poincaré.

Os autores obtiveram o resultado de que a dinâmica do mapa logístico é melhor representada, neste caso, quando a CSCM é definida por meio da distância de Wootters. O principal fato que levou a essa conclusão foi o comportamento do expoente de Lyapunov e, como resultado, o grau relativo de “caoticidade”. O expoente de Lyapunov cresce com o parâmetro r e, desse modo, uma boa medida de complexidade deveria iniciar com valores pequenos na vizinhança anterior de r_∞ e crescer em função de r , até que, quando a caoticidade tornar-se o fator dominante da dinâmica, a medida de complexidade estatística deveria ser nula. Esse é exatamente o comportamento observado para a CSCM com $D = D_W(\vec{P}_1, \vec{\mathcal{I}})$, Eq. 3.52. O comportamento da CSCM por meio da norma euclidiana l_2 , isto é, com $D_2(\vec{p}, \vec{\mathcal{I}}) = \|\vec{p} - \vec{\mathcal{I}}\|_2$, definida na Eq. 3.8 não captura a essência desta dinâmica.

4 Medida de complexidade estatística quântica (QSCM)

4.1 Como quantificar a complexidade estatística quântica

4.1.1 Definição da medida de complexidade estatística quântica (QSCM)

A versão quântica da medida de complexidade estatística deveria medir a quantidade de complexidade contida em um sistema quântico, na escala de ordem e desordem. Para sistemas quânticos, as distribuições de probabilidade são substituídas por matrizes densidade (operadores positivos, semi-definidos e de traço um). De maneira similar à do caso clássico, os casos extremos de ordem e desordem são, respectivamente, os estados quânticos puros $|\psi\rangle\langle\psi|$ e os estados maximamente mistos $\mathcal{I} := \mathbb{I}/N$, onde N é a dimensão do espaço de Hilbert-Schmidt dos sistemas quânticos em questão. Também em analogia com a descrição para distribuições de probabilidade clássicas, a medida de complexidade estatística quântica deveria ser nula para os graus máximos de ordem e desordem. Pode-se definir a medida de complexidade estatística quântica (QSCM) como o produto de uma função que quantifica o “grau de ordem” e um quantificador de “grau de desordem”: uma entropia quântica, que mede a quantidade de desordem relacionada a um sistema quântico e uma medida de distinguibilidade entre pares de estados quânticos que desempenha o papel de uma função *desequilíbrio*. Uma das funções para medir a quantidade de desordem de um sistema quântico é a entropia de von Neumann S , dada por:

$$S(\rho) = -\text{Tr}[\rho \log(\rho)], \quad (4.1)$$

onde ρ é a matriz densidade do sistema. A distância do traço D entre ρ e o estado maximamente misto normalizado quantifica o grau de ordem do sistema:

$$D(\rho, \mathcal{I}) \equiv \|\rho - \mathcal{I}\|_1 = \frac{1}{2} \text{Tr} \sqrt{(\rho - \mathcal{I})^2}. \quad (4.2)$$

Com as funções quantificadoras dos graus de ordem e desordem definidas, definimos em [53] a medida de complexidade estatística quântica (QSCM), conforme a Def. 5

Definição 5 (medida de complexidade estatística quântica - *quantum statistical complexity measure* - (QSCM)). *Seja $\rho \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_N)$ um estado quântico em um espaço de Hilbert de dimensão N . Desse modo, podemos definir uma medida de complexidade estatística quântica como o seguinte funcional de ρ :*

$$\mathcal{C}(\rho) = \frac{1}{\log N} S(\rho) \cdot D(\rho, \mathcal{I}), \quad (4.3)$$

onde $S(\rho)$ é a entropia de von Neumann e $D(\rho, \mathcal{I})$ é a função distinguibilidade que diferencia o estado ρ do estado maximamente misto normalizado \mathcal{I} .

Em analogia com a contrapartida clássica, na definição da medida de complexidade estatística quântica, há uma *carte blanche* na escolha da função de entropia quântica, como, por exemplo, a entropia quântica de Rényi [100], ou a entropia quântica de Tsallis [101]. Da mesma forma, podemos escolher outras funções de desequilíbrio tais como várias medidas de distinguibilidade de estados quânticos. Podemos escolher, por exemplo, alguma norma Shatten- p [102], ou uma entropia relativa quântica de Rényi [103], uma medida “*quantum skew divergence*” [104], ou uma entropia relativa quântica qualquer [105]. Outra característica que pode auxiliar na generalização da medida é definir um estado quântico mais geral ρ^* como referência, em vez do estado maximamente misto normalizado \mathcal{I} , na função de desequilíbrio. Essa escolha deve ser guiada por alguma simetria física ou por algum interesse físico *a priori*. Alguns candidatos óbvios para estes estados mais gerais são o estado quântico térmico misto e o estado quântico puro térmico canônico [106, 107].

Nesta tese, iremos definir a medida de complexidade estatística quântica (QSCM), conforme dito na Def. 6, por meio da distância do traço entre o estado quântico reduzido ρ e a identidade reduzida (na dimensão correta) \mathcal{I} , definido como o estado de referência [53]. A função “distância do traço” foi escolhida, tanto na Def. 5, quanto na Def. 6, porque é a distância mais distinguível no espaço de Hilbert e, também, é monotônica sob operações estocásticas [53].

Definição 6 (medida de complexidade estatística quântica da matriz reduzida). *Seja $\rho_{SE} \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_{NM})$ um sistema global de dimensão NM , ou qualquer estado composto de um sistema e seu ambiente, e seja $\rho = \rho_S = \text{Tr}_E[\rho_{SE}] \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_N)$, de dimensão N , o estado reduzido deste estado composto (em que Tr_E é o traço-parcial sobre o ambiente). Desse modo, podemos definir a medida de complexidade estatística quântica da matriz reduzida $\mathcal{C}(\rho_S)$ como:*

$$\begin{aligned} \mathcal{C}(\rho_S) &= \mathcal{C}(\text{Tr}_E[\rho_{SE}]) = \frac{1}{\log N} S(\text{Tr}_E[\rho_{SE}]) \cdot D(\text{Tr}_E[\rho_{SE}], \mathcal{I}), \\ \mathcal{C}(\rho_S) &= \frac{1}{\log N} S(\rho_S) \cdot D(\rho_S, \mathcal{I}), \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde $S(\rho_S)$ é a entropia de von Neumann do estado reduzido $\rho_S = \text{Tr}_E[\rho_{SE}]$, e $D(\rho_S, \mathcal{I})$ é a função distinguibilidade entre o estado reduzido (ρ_S), e o estado maximamente misto \mathcal{I} , definido no espaço adequado.

Para nossos propósitos aqui, usaremos a Def. 6 (medida de complexidade estatística quântica da matriz de densidade reduzida) como a medida de complexidade estatística quântica (QSCM), que será utilizada nesta tese [53]. O motivo dessa escolha é que estudaremos as transições de fase quânticas, portanto, aplicaremos a QSCM no estado de um *qubit* (reduzido de $N \rightarrow \infty$ partes), isto é, no limite termodinâmico, no caso do

modelo de Ising-1D, (Sec. 5.5), e no caso do modelo de Heisenberg XXZ-1/2, (Sec. 5.6), aplicaremos a QSCM no estado de dois *qubits* no limite termodinâmico. A Def. 6 é o análogo quântico da Def. 2, *i.e.*, é a contrapartida quântica da CSCM definida por meio das “distribuições de probabilidade marginais”. Extensões dessas medidas definidas acima, para variáveis contínuas, são triviais e não merecem uma discussão mais detalhada.

4.1.2 Algumas propriedades importantes da QSCM

Para completar a introdução da medida de complexidade estatística quântica, devemos exigir algumas propriedades importantes, com o objetivo de garantir um quantificador de informação de *bona fide*. A quantidade de ordem e desordem, medida pela QSCM, deve ser invariante em operações unitárias locais porque está relacionada com a pureza dos estados quânticos [53].

Proposição 2 (invariância por unitárias locais). *A medida de complexidade estatística quântica é invariante sob a aplicação de transformações unitárias locais, aplicadas no estado quântico reduzido. Seja um estado quântico $\rho = \rho_S \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_S)$ reduzido (cuja dimensão é igual a N), e seja $\rho_{SE} \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_{SE})$ o estado composto do sistema-ambiente, de dimensão NM , tal que $\rho_S = \text{Tr}_E[\rho_{SE}]$, logo:*

$$\mathcal{C}(U_S \rho U_S^\dagger) = \mathcal{C}(\rho), \quad (4.5)$$

onde $\rho = \rho_S \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_S)$, e U_S é uma transformação unitária local que atua no espaço $\mathcal{D}(\mathcal{H}_S)$, e Tr_E é o traço parcial sobre os graus de liberdade do ambiente E . A extensão desta propriedade para o caso global (ρ_{SE}) é trivial e direta.

A prova para esta afirmação é trivial e advém diretamente da invariância sob transformações unitárias da entropia de von Neumann e da distância do traço. Outra propriedade importante diz respeito ao caso de compor o sistema com muitas cópias em algum contexto experimental qualquer. Consideremos um experimento em que o experimentalista deva quantificar a QSCM de um dado estado ρ por meio de um certo número n de cópias idênticas $\rho^{\otimes n}$, o que implica, portanto, que a QSCM das cópias deve ser limitada pela quantidade de apenas uma cópia [53].

Proposição 3 (subaditividade da medida de complexidade estatística quântica). *Dado um estado produto $\rho^{\otimes n}$, com $\dim(\rho) = N$, a medida de complexidade estatística quântica (QSCM) é uma função subaditiva:*

$$\mathcal{C}(\rho^{\otimes n}) \leq n\mathcal{C}(\rho). \quad (4.6)$$

De fato, esta é uma propriedade razoável e esperada para uma boa medida de informação, uma vez que o número regularizado de *bits* de informação obtidos de um

determinado sistema não pode aumentar apenas considerando-se mais cópias do mesmo sistema. A prova da Proposição 3 está no Apêndice A e advém da aditividade da entropia de von Neumann e da subaditividade da distância do traço [53].

É importante notar que a complexidade estatística quântica não é trivialmente subaditiva sobre extensões gerais com estados quânticos, por exemplo:

i. extensões com estados maximamente mistos: vamos considerar um dado estado ρ é estendido com um estado maximamente misto $\mathcal{I} = \mathbb{I}/N$, com $\dim(\rho) = \dim(\mathcal{I}) = N$.

$$\mathcal{C}(\rho \otimes \mathcal{I}) = \frac{S(\rho) + \log N}{2 \log N} D(\rho, \mathcal{I}), \quad (4.7)$$

$$= \frac{\mathcal{C}(\rho)}{2} + \frac{D(\rho, \mathcal{I})}{2}, \quad (4.8)$$

$$\leq \frac{\mathcal{C}(\rho)}{2} + \frac{1}{2}. \quad (4.9)$$

A Eq. (4.9) apresenta um limite superior para a QSCM para o estado estendido. Esse recurso demonstra que a medida do estado composto é limitada pelo resultado de uma cópia [53].

ii. Na Eq. (4.12), apresentamos a QSCM para uma extensão um pouco *mais geral dada por* $\rho^{\otimes n} \otimes \mathcal{I}^{\otimes n}$. Esse resultado também mostra que a medida do estado composto é igualmente limitada pela quantidade de uma cópia.

$$\mathcal{C}(\rho^{\otimes n} \otimes \mathcal{I}^{\otimes n}) \leq n \frac{S(\rho) + \log N}{2 \log N} D(\rho, \mathcal{I}), \quad (4.10)$$

$$\leq n \left(\frac{\mathcal{C}(\rho)}{2} + \frac{D(\rho, \mathcal{I})}{2} \right), \quad (4.11)$$

$$\leq n \left(\frac{\mathcal{C}(\rho)}{2} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.12)$$

iii. Como um último exemplo de propriedade, QSCM não é extensiva em relação a composições mais gerais, vamos considerar a extensão com um estado puro $|\psi\rangle\langle\psi|$, com dimensões $\dim(\rho) = \dim(|\psi\rangle\langle\psi|)$, [53]. O análogo desta propriedade para o domínio clássico pode ser observado em [108].

$$\mathcal{C}(\rho \otimes |\psi\rangle\langle\psi|) = \frac{S(\rho)}{2 \log N} D(\rho, |\psi\rangle\langle\psi|), \quad (4.13)$$

$$\leq \frac{S(\rho)}{2 \log N} \left(D(\rho, \mathcal{I}) + \frac{N-1}{N} \right). \quad (4.14)$$

Conforme discutido, a QSCM é uma medida que pretende detectar mudanças nas propriedades, como, por exemplo, mudanças nos tais padrões de ordem e desordem. Portanto, a medida deve ser uma função contínua sobre os parâmetros dos estados responsáveis por suas características de transição. Naturalmente, a complexidade quântica é uma função contínua, uma vez que advém do produto de duas funções contínuas. Devido

à continuidade, é possível definir a função derivada da medida de complexidade estatística quântica [53]:

Definição 7 (derivada). *Consideremos um sistema físico descrito pelo conjunto de estados de um parâmetro: $\rho(\alpha) \in \mathcal{D}(\mathcal{H}_N)$, para $\alpha \in \mathbb{R}$. Podemos definir a derivada em relação ao parâmetro α como:*

$$\frac{d\mathcal{C}}{d\alpha} := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{C}(\rho(\alpha + \varepsilon)) - \mathcal{C}(\rho(\alpha))}{\varepsilon}. \quad (4.15)$$

Da mesma maneira tal como definida na Def. 7, é possível obter derivadas de ordens mais altas, tais como, por exemplo $\frac{d^2\mathcal{C}}{d\alpha^2}$, e assim por diante [53].

Em baixas temperaturas, os sistemas físicos são tipicamente ordenados e, à medida que aumentamos a temperatura de um sistema, eles podem sofrer transições de fase ou de ordem e desordem para estados menos ordenados: sólidos perdem sua forma cristalina em uma transição sólido-líquido; substâncias ferromagnéticas tais como o ferro perdem a sua ordem magnética se aquecido acima do ponto de Curie em uma transição ferromagnética-paramagnética, *etc.* A descrição de sistemas físicos depende de grandezas mensuráveis tais como temperatura, força de interação, correlação entre variáveis, orientação de um campo externo, *etc.* Essas grandezas podem ser descritas por parâmetros em um espaço adequado, por exemplo, consideremos um parâmetro que descreve alguma quantidade física α , e um conjunto de estados de um parâmetro indicado por $\{\rho(\alpha)\}$.

As transições de fase quânticas são fenômenos fundamentais na física da matéria condensada e estão intimamente relacionadas às correlações quânticas. Elas são caracterizadas por uma mudança abrupta e acentuada na complexidade do sistema físico que exhibe tais fenômenos emergentes quando este parâmetro de controle adequado α excede um determinado valor crítico. O estudo de transições entre correlações, com o objetivo de inferir propriedades físicas de um sistema, pode gerar grande interesse e pode detectar física nova. Sabemos que, no ponto de transição de fase, o estado reduzido de N partículas sofre transições abruptas que passam desde estados que possuem certa pureza e mudam abruptamente para estados reduzidos que são mistos.

Essas transições podem indicar um certo tipo de transição de correlações, e transições de fase acarretam mudanças abruptas nas correlações entre os componentes do sistema, que podem ser facilmente detectadas. Para sistemas compostos de muitas partículas, uma mudança rápida no grau de ordem e desordem local pode ser associada a uma transição no padrão de correlações. Desta forma, uma mudança detectável nestes parâmetros pode indicar uma alteração na configuração do sistema que é considerada aqui como uma mudança no padrão de ordem e desordem. Para os propósitos desta tese, na Def. 8 definimos o que consiste uma transição de correlações, Ref. [53]:

Definição 8 (transição de correlações). *Em sistemas de muitas partículas, uma transição de correlações ocorre quando um sistema muda de um estado que possui uma certa ordem, padrão ou correlação para outro estado que possui outro padrão de ordem ou correlação.*

Na Def. 8 consideramos, por simplicidade, que há uma relação unívoca entre um determinado “padrão de ordem” e uma determinada correlação entre diversas partes do sistema. Pontos críticos e transições de fase quânticas para modelos hamiltonianos com campos magnéticos externos em temperaturas finitas já foram estudados extensivamente na literatura. No cenário da teoria da informação quântica, as funções de correlação quânticas utilizadas nesses estudos de transições de fase quânticas são geralmente a concorrência e a discórdia quântica (para uma revisão sobre discórdia, veja [109, 110]). O comportamento das correlações quânticas para cadeias de Heisenberg XXZ de *spin*-1/2 via negatividade, déficit de informação e *trace distance discord* foi investigado em [111]. No entanto, outras medidas de correlações quânticas também foram propostas para detectar transições de fase quânticas, tais como: *local quantum uncertainty* em [112], emaranhamento de formação em [113, 114], discórdia quântica (já mencionada acima), além da análise dos diversos tipos de correlações clássicas [115].

Os autores, na Ref. [116], revelaram uma transição de fase quântica em uma cadeia infinita XXZ-1D, utilizando-se da concorrência e das desigualdades de Bell. Os comportamentos da discórdia quântica, coerência quântica e *Wigner–Yansase skew information*, as relações entre as transições de fase e os pontos de simetria nas cadeias de Heisenberg XXZ de *spin*-1 foram amplamente investigadas na Ref. [117]. As propriedades do estado fundamental do modelo de Hubbard estendido unidimensional, para a perspectiva de sua matriz densidade reduzida de N partículas, foram estudadas na Ref. [118]. Eles se concentraram na matriz densidade reduzida de dois férmions e realizaram uma análise de suas correlações quânticas e coerência ao longo das diferentes fases do modelo.

De forma abstrata, um estado quântico sistema-ambiente, cujo estado reduzido passa por um caminho através do estado equiprovável (no caso quântico, é representado pelo estado maximamente misto normalizado), é um exemplo de tais transições que podem possuir algum significado físico como veremos mais adiante em alguns exemplos. Suponhamos que um certo subespaço de um sistema quântico possa ser interpretado como possuindo uma certa ordem (*e.g.*, um estado composto de N partículas com um determinado grau de pureza) e que exista um caminho no qual este subespaço passa pelo estado maximamente misto normalizado [53].

Mudanças abruptas em quantidades físicas que porventura ocorram durante esse caminho podem ser interpretadas e analisadas como um indicativo da ocorrência de uma transição entre correlações, conforme a Def. 8, quantificada em uma escala de ordem e desordem. Para ilustrar o formalismo da medida de complexidade estatística quântica nesse contexto de transição ordem e desordem, na Sec. 5 nós o aplicamos a dois sistemas

quânticos bem conhecidos que exibem transições de fase quânticas: o modelo de Ising 1D quântico (Sec. 5.5), e o modelo de Heisenberg XXZ de *spin*-1/2, Sec. 5.6, ver [53].

4.2 A QSCM para estados *multipartites* reduzidos

A ocorrência de emaranhamento em sistemas multipartidos é uma das características mais importantes e distintas da teoria quântica. Com o número cada vez maior de aplicações do emaranhamento como recurso, a sua quantificação¹ tornou-se um tópico contemporâneo de pesquisa em informação quântica. Apesar de o emaranhamento para estados puros e mistos de dois *qubits* já ser um assunto bem explorado, até o presente não existe uma teoria geral que seja aceita para a classificação/quantificação do emaranhamento em sistemas de muitas partes, devido à enorme quantidade de topologias de correlação [119].

Na teoria da informação quântica, o estado denominado de estado $|GHZ\rangle$, isto é, estado devido a: “Greenberger, Horne, Zeilinger” (*cf.* [120, 121]), consiste em um estado de 3 partes (neste caso, de três *qubits*), representante de uma das duas classes de estados não-separáveis, nesta dimensão, e é dado pela Eq. 4.16:

$$|GHZ\rangle = a|000\rangle + b|111\rangle, \quad (4.16)$$

com $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Para o caso especial simétrico, $a = b = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Outro estado que representa o emaranhamento de 3 ou mais partículas é o estado $|W\rangle$. Para três *qubits*, esse estado é representado² pela Eq. 4.17:

$$|W\rangle = c|001\rangle + d|010\rangle + e|100\rangle, \quad (4.17)$$

com $|e|^2 + |d|^2 + |c|^2 = 1$. O caso especial simétrico ocorre quando: $e = d = c = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

Esses dois estados puros, $|GHZ\rangle$ e $|W\rangle$, representam duas classes distintas de emaranhamento, porque não podem ser transformados (nem mesmo probabilisticamente) um no outro por operações quânticas locais. Observando-se os casos simétricos, podemos notar que o estado $|W\rangle$ possui um emaranhamento um pouco menor do que o emaranhamento do estado $|GHZ\rangle$. Apesar de não existir uma medida padrão de emaranhamento *multipartite* para comparação de topologias distintas de emaranhamento que não são mutuamente conversíveis, muitas medidas definem o estado $|GHZ\rangle$ como o estado maximamente emaranhado para esta dimensão.

Uma propriedade importante do estado $|GHZ\rangle$ é que se escrevermos a matriz densidade para este estado puro, $\rho_{GHZ} = |GHZ\rangle\langle GHZ|$, e traçarmos um dos subsistemas, por exemplo o subsistema 3, iremos obter um estado reduzido ρ_{GHZ}^{12} . Este estado reduzido é

¹Todos os resultados exibidos na Sec. 4.2 são novos, e ainda não estão publicados em nenhum periódico.

²O estado $|W\rangle$ foi nomeado devido a Wolfgang Dür [122]. Entretanto, nota-se uma estrutura parecida com um “W”, com cada uma das suas “pontas” dadas pelos “1”. Observe o estado reescrito: $|W\rangle = e|100\rangle + d|010\rangle + c|001\rangle$.

misto e separável (para o caso simétrico, com $|a|=|b|=\frac{1}{\sqrt{2}}$, o estado reduzido é um estado maximamente misto naquele subespaço). Portanto, $\rho_{GHZ}^{12} = \text{Tr}_3 |GHZ\rangle\langle GHZ|$, logo, $\rho_{GHZ}^{12} = |a|^2|00\rangle\langle 00| + |b|^2|11\rangle\langle 11|$. Onde Tr_3 significa o traço parcial sobre o subsistema 3.

Já o estado puro $|W\rangle$, cuja matriz densidade é dada por $\rho_W = |W\rangle\langle W|$, pode ser descrito pela seguinte propriedade interessante: caso uma das três partes seja perdida (um dos três *qubits* seja descartado), o estado reduzido $\rho_W^{12} = \text{Tr}_3 |W\rangle\langle W|$ ainda será emaranhado. Essa espécie de “robustez” do emaranhamento do estado tipo $|W\rangle$ contrasta com o emaranhamento do estado $|GHZ\rangle$, que se torna separável após a perda de uma das suas partes. A entropia de emaranhamento (entropia de von Neumann do estado reduzido) consiste em uma boa medida para compararmos o emaranhamento de estados puros. Considerando-se apenas estados simétricos, a entropia de emaranhamento para o $|GHZ\rangle$ é dada por S_{GHZ} e, podemos calcular: $S_{GHZ} = \log(2) \approx 0.69 > S_W = \log(\frac{3}{2^{2/3}}) \approx 0.64$, em que a última quantidade é a entropia de emaranhamento do estado $|W\rangle$.

A Fig. 5 mostra a medida de complexidade estatística quântica (QSCM) para o estado $|GHZ\rangle$ reduzido da terceira parte, isto é, $\mathcal{C}(\rho_{GHZ}^{12})$, para $0.01 < |a| \leq 1$. Podemos observar que o ponto de máximo ocorre em $|a|=|b|=\frac{1}{\sqrt{2}}$. Os mínimos locais ocorrem para $|a|=\sin(\pi/6)$ e para $|a|=\cos(\pi/6)$.

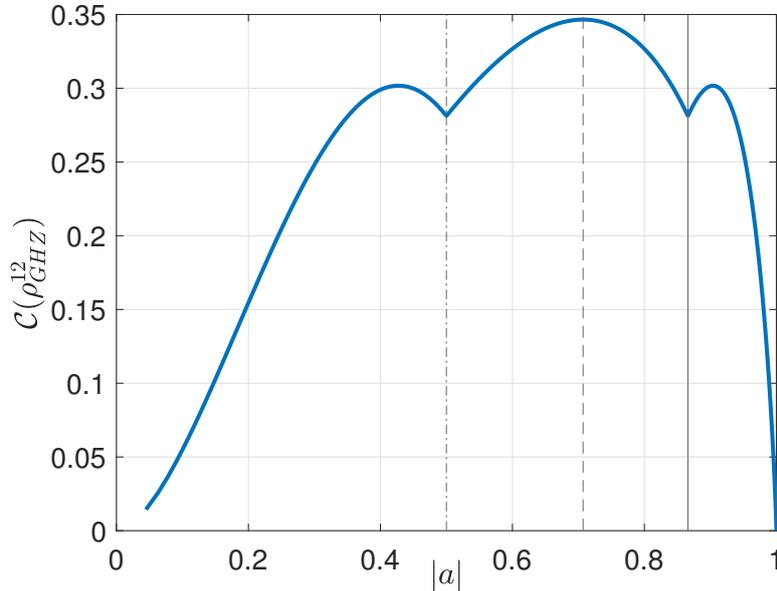


Figura 5 – Medida de complexidade estatística quântica (QSCM) para o estado $|GHZ\rangle$ reduzido de um *qubit*: $\mathcal{C}(\rho_{GHZ}^{12})$, para $0.01 < |a| \leq 1$. A reta vertical traço-ponto corresponde ao valor $|a|=\sin(\pi/6)$. O valor $|a|=\frac{1}{\sqrt{2}}$ está representado pela reta vertical tracejada. A reta vertical contínua corresponde ao valor $|a|=\cos(\pi/6)$.

Isso ocorre devido ao fato de $|a|^2+|b|^2=1$ e a função $\mathcal{C}(\rho_{GHZ}^{12}) = S(\rho_{GHZ}^{12}) \cdot D(\rho_{GHZ}^{12} - \mathcal{I}/4)$ atingir mínimos locais para esses valores de $|a|$. À medida que $|a| \in [0.01, 1]$, cada uma das partes da função $D(\rho_{GHZ}^{12} - \mathcal{I}/4) = ||a|^2 - \frac{1}{4}| + ||b|^2 - \frac{1}{4}|$ se anulará quando $|a|=\sin(\pi/6)$,

ou quando $|b|^2 = 1 - |a|^2 = \cos(\pi/6)$, o que gera os pontos de mínimo local. Quando $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$, o estado tripartite ρ_{GHZ} é maximamente emaranhado e $\mathcal{C}(\rho_{GHZ}^{12})$ atinge o ponto de máximo.

Podemos observar uma transição de correlação, quantificada na escala de ordem e desordem, do tipo definido na Def. 8, ao observarmos os mínimos locais na Fig. 5, quando o parâmetro $|a|$ varia continuamente. Ainda que a entropia aumente consideravelmente com o aumento de $|a|$, o fato de a função tornar-se localmente nula faz com que existam estas cúspides. Quando os valores de $|a|$ aumentam e, conseqüentemente, os valores de $|b|$ diminuem, há uma troca contínua entre os subespaços de $|00\rangle\langle 00|$ e $|11\rangle\langle 11|$ e suas possíveis correlações. Esta é o tipo de transição a que a medida QSCM mostrou-se ser sensível.

A Fig. 6 ilustra as curvas de níveis do mapa de contorno da medida de complexidade estatística quântica, QSCM, para o estado $|W\rangle$ reduzido de uma parte: $\mathcal{C}(\rho_W^{12})$, para $|e| = 0.2$, $|c| \in [0, 1]$, $|d| \in [0, 1]$. Esse contorno foi realizado de tal modo que $|c|^2 + |d|^2 + |e|^2 = 1$. A região de máximo para $\mathcal{C}(\rho_W^{12})$, para o caso estudado, ocorre para $|c| = |d| \approx \frac{1}{\sqrt{3}}$.

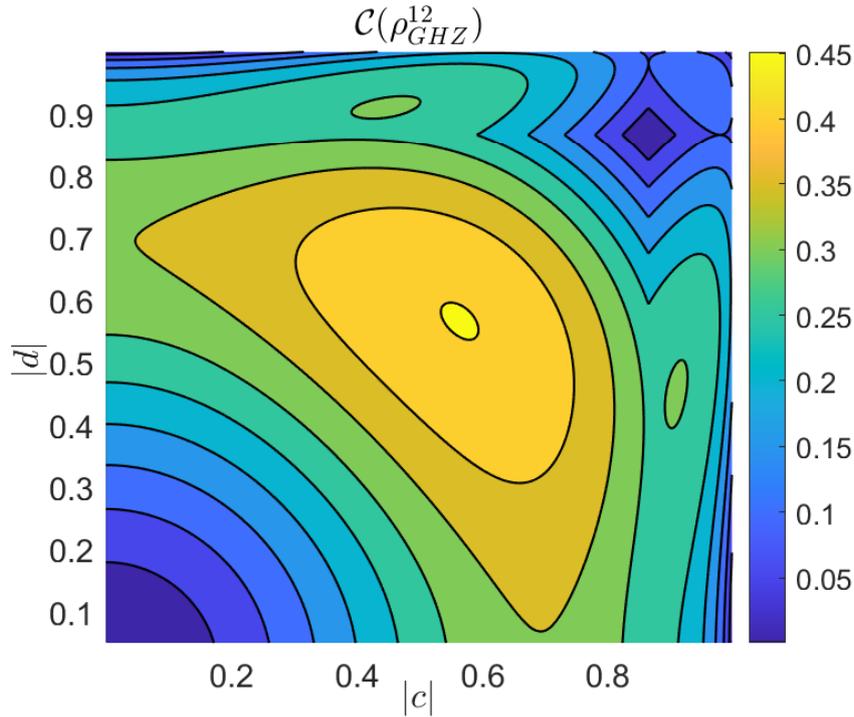


Figura 6 – Mapa de contorno da medida de complexidade estatística quântica (QSCM) para o estado $|W\rangle$ reduzido de um *qubit*: $\mathcal{C}(\rho_W^{12})$, para $|e| = 0.05$, $|c| \in [0, 1]$, $|d| \in [0, 1]$, com $|c|^2 + |d|^2 + |e|^2 = 1$.

A Fig. 6 mostra que QSCM, normalizada da mesma maneira para ambos os estados, atingiu um valor maior, para o estado reduzido ρ_W^{12} , do que para o estado reduzido ρ_{GHZ}^{12} , isto é, $\mathcal{C}(\rho_W^{12}) \approx 0.4511 > \mathcal{C}(\rho_{GHZ}^{12}) \approx 0.3466$. Esse resultado, provavelmente, indica que o fato do estado reduzido de $|W\rangle$ poder atingir maiores valores de complexidade estatística, pode ser devido à sua topologia e robustez de emaranhamento após uma das suas partes

ser perdida. O fato do estado reduzido ρ_W^{12} ainda ser emaranhado (possuir correlações não-clássicas), e o estado reduzido ρ_{GYZ}^{12} ser separável, poderia ser o responsável por esse comportamento interessante.

Esses resultados obtidos podem ser úteis, em possíveis trabalhos futuros, para a determinação de transições de correlações entre estados com topologia de emaranhamento diferentes, tais como as exemplificadas nos estados estudados nesta seção.

5 Exemplos e aplicações

Nesta seção, calculamos analiticamente a expressão de QSCM para um *qubit* na Sec. 5.1 e apresentamos a aplicação da QSCM em dois sistemas físicos para evidenciar transições de fase quânticas e transições de correlação para o modelo de Ising $1D$ quântico na Sec. 5.5 e no modelo de Heisenberg XXZ de *spin*-1/2, na Sec. 5.6. Todos os principais resultados da Sec. 5 foram exibidos em [53], exceto os cálculos expostos na Sec. 5.2.

5.1 QSCM de um *qubit* na base de Bloch

Seja um estado quântico de um *qubit* dado por ρ , escrito na base de Bloch: $\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma})$. Na Eq. (5.1), exibimos analiticamente (em [53]) a medida de complexidade estatística quântica para um *qubit* $\mathcal{C}(\rho)$, definida da mesma forma na Def. 5, (Eq. 4.3):

$$\mathcal{C}(r) = -\frac{r^2}{2} \operatorname{arctanh}(r) - \frac{r}{4} \log \left(\frac{1-r^2}{4} \right). \quad (5.1)$$

Onde $\vec{r} = (x, y, z)$, $r = |\vec{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, com $0 \leq r \leq 1$. O vetor $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T$ é definido como o “vetor” de matrizes de Pauli [53].

É interessante notar que a complexidade estatística quântica para um *qubit*, escrito na base de Bloch, é uma função dependente apenas de r . Esse fato decorre claramente da Prop. 2. Esta expressão analítica será útil no estudo de transição de fase quântica no modelo $1D$ -Ising, discutido na Sec. 5.5, onde será obtida uma expressão analítica para o estado de um *qubit* reduzido de N *spins*, no limite termodinâmico [53]. Outras expressões que poderiam ser úteis em algum contexto podem ser obtidas, por exemplo, a distância do traço¹ entre o estado e o estado maximamente misto e normalizado, para um *qubit*, também é função apenas de r , na base de Bloch, $D(r) = r/2$, e, portanto, a função de entropia pode ser facilmente escrita como $S(r) = 2\mathcal{C}(r)/r$, por meio da Eq. (5.1). Além disso, exibimos a primeira (Eq. (5.2)), e a segunda (Eq. (5.3)) derivadas da QSCM, para um *qubit* escrito na Base de Bloch [53]:

$$\frac{d\mathcal{C}(r)}{dr} = -r \cdot \operatorname{arctanh}(r) - \frac{1}{4} \log \left(\frac{1-r^2}{4} \right), \quad (5.2)$$

$$\frac{d^2\mathcal{C}(r)}{dr^2} = -\frac{r}{2(1-r^2)} - \operatorname{arctanh}(r). \quad (5.3)$$

Ademais de uma possível serventia em outros contextos analíticos em futuros trabalhos, a utilidade das Eq. 5.2 e Eq. 5.3 tornar-se-á clara quando obtivermos analiticamente

¹Distância do traço normalizada.

o estado de um *qubit* para o modelo de Ising Quântico $1D$ escrito na base de Bloch. O fato de termos obtido o módulo do vetor de Bloch para este modelo analiticamente, no limite termodinâmico, justifica a exibição da QSCM para um *qubit* nessa base.

5.2 Modelo de Ising quântico $1D$

5.2.1 Introdução ao modelo de Ising quântico $1D$

O modelo de Ising clássico $1D$ foi originalmente proposto por Wilhelm Lenz para seu estudante de física Ernest Ising. Em sua tese de doutorado de 1924 [123], ele resolveu o modelo clássico unidimensional e chegou à conclusão inicialmente de que o modelo não apresentava transição de fase. O modelo em si era de uma construção matemática simples e tinha o objetivo de representar o ferromagnetismo. A ideia era a seguinte: um material ferromagnético é modelado como uma rede de *spins* interativos que estão sob a ação de um campo magnético externo. Essa interação é tal que a energia é tão menor quanto maior o número de *spins* vizinhos estiverem alinhados ao campo magnético. A variável *spin*, neste modelo clássico $1D$, é apenas uma variável discreta que pode possuir apenas os valores ± 1 . No caso do modelo clássico $2D$, a energia de interação entre os *spins* disputa com a energia local fornecida pelo campo externo e podemos esperar uma transição de fase no modelo clássico $2D$, que é isomorfo ao modelo quântico $1D$ que será estudado nesta tese.

O modelo de Ising quântico $1D$ mostra uma transição de fase e, embora simples, possui uma física bastante interessante e consiste em um *toy model* para muitos trabalhos de informação quântica. A principal motivação no estudo desse tipo de modelo consiste no fato de que as cadeias de *spin* têm grande interesse na modelagem de computadores quânticos, e o estudo de tais sistemas finitos possui muitas aplicações na teoria da informação quântica. Existem muitos estudos sobre o emaranhamento desses modelos de rede e, também, há vários trabalhos que mostram como as medidas de emaranhamento podem detectar transições de fase em alguns desses modelos hamiltonianos. Este capítulo é uma introdução a esse modelo e sua solução analítica, que também foi realizada por muitos outros autores da literatura [124–127]. Aqui, usaremos Damski *et al.* [127] como referência principal. Esse trabalho apresenta uma descrição mais completa dos efeitos de um sistema finito, bem como descreve todos os subespaços envolvidos no processo de diagonalização do hamiltoniano. Nosso principal objetivo aqui é escrever o estado de um *qubit*, reduzido de N partículas, no limite termodinâmico, na base de Bloch, para o modelo de Ising quântico $1D$ com campo magnético externo. Após esse procedimento, usaremos as quantidades analíticas definidas nas Eqs. 5.2 e 5.3 para calcularmos a QSCM no limite termodinâmico.

Vamos definir o modelo de Ising quântico $1D$, no qual as variáveis discretas usadas para representar os *spins* são modificadas por operadores e a interação entre esses *spins*

(ou *qubits*) em uma rede é dada pelo seguinte hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^x \sigma_j^x - g \sum_i \sigma_i^z, \quad (5.4)$$

onde σ^μ ; $\mu = \{x, y, z\}$ são as matrizes de Pauli, J é uma constante de troca que define a escala de força da interação entre os pares de vizinhos mais próximos - $\langle i, j \rangle$, e g é o parâmetro que representa o campo externo transversal que irá induzir a transição de fase quântica, como iremos ver posteriormente.

Podemos definir $J = 1$, sem nenhuma perda de generalidade, devido ao fato de J apenas definir a escala de energia do sistema. Consideremos uma cadeia de N *qubits* com condições de contorno periódicas, tal que para qualquer operador \hat{O}_{N+1} , valha o seguinte $\hat{O}_{N+1} = \hat{O}_1$. O espaço de Hilbert deste sistema é o produto tensorial do espaço de Hilbert de cada sítio: $\mathcal{H} = (\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$. Desse modo, podemos reescrever a Eq.5.4 como:

$$H(g) = - \sum_i^N \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - g \sum_i \sigma_i^z. \quad (5.5)$$

É importante mencionar que um operador σ_i^μ significa $\mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \dots \otimes \sigma_i^\mu \otimes \dots \otimes \mathbb{I}_N$, com a atuação do operador σ_i^μ na posição i -ésima e \mathbb{I}_i significa o operador identidade. A mesma notação se aplica ao operador $\sigma_i^\mu \sigma_j^{\mu'}$ (no qual o leitor deve imaginar e adicionar produtos tensoriais com matrizes identidades nos sítios de índices ausentes). Podemos estudar muito brevemente dois casos simples em que o estado fundamental é facilmente obtido. O primeiro caso consiste no limite de campo magnético nulo $g = 0$. Nesse caso, o hamiltoniano é composto apenas pelo termo de interação, conforme mostrado na Eq. 5.6:

$$H^{g=0} = - \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x. \quad (5.6)$$

O estado fundamental é apenas os dois possíveis estados ferromagnéticos (e qualquer combinação destes, devido à degenerescência na energia) ao longo da direção positiva e negativa do eixo x :

$$\begin{aligned} |GS_1^{g=0}\rangle &= |\rightarrow \rightarrow \dots \rightarrow\rangle = \prod_i^N \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_i\rangle + |\downarrow_i\rangle), \\ |GS_2^{g=0}\rangle &= |\leftarrow \leftarrow \dots \leftarrow\rangle = \prod_i^N \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_i\rangle - |\downarrow_i\rangle). \end{aligned} \quad (5.7)$$

O segundo caso é definido pelo limite $g \gg 1$. O hamiltoniano consiste em apenas o operador σ^z que atua na cadeia de *spins*, Eq. 5.8. O estado fundamental deste hamiltoniano é apenas um estado produto $|\uparrow_i\rangle$, isto é, estado este que minimiza a energia do sistema e está representado na Eq. 5.9

$$H^{g \gg 1} = - \sum_{i=1}^N g \sigma_i^z, \quad (5.8)$$

$$|GS^{g \gg 1}\rangle = |\uparrow \uparrow \dots \uparrow\rangle. \quad (5.9)$$

Encontrar o estado fundamental do modelo fora dos limites triviais $g = 0$ e $g \gg 1$ é um dos nossos objetivos aqui e, para isso, a diagonalização deste hamiltoniano segue três etapas: uma transformação de Jordan-Wigner, uma transformada discreta de Fourier e uma transformação de Bogoliubov. Nas próximas subseções, cada um destes procedimentos é explicado em detalhes, e a interpretação física também é fornecida quando apropriado.

5.2.2 A transformação de Jordan-Wigner

O primeiro passo é transformar a Eq. 5.5 em um hamiltoniano quadrático fermiônico. Esta classe de hamiltonianos pode ser resolvida analiticamente e foi diagonalizada primeiramente por Lieb *et al.* [128]. Para isso, usaremos uma ferramenta chamada de transformada de Jordan-Wigner. O ponto central dessa transformada consiste em mapear o espaço de Hilbert de *spins* interagentes em um sistema de férmions interagentes, que seja equivalente ao primeiro.

Para sermos mais claros, o espaço de N qubits $\mathcal{H} = (\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$ pode ser mapeado em um sistema de férmions sem *spin* com orbitais simples no espaço de Fock correspondente \mathcal{F}_N^2 . Desse modo, teremos: $\mathcal{H} = \mathcal{F}_- (\mathbb{C}^N)$. Os autoestados do operador σ^z são o “*spin* para cima”: $|\uparrow\rangle$ e o “*spin* para baixo”: $|\downarrow\rangle$, com autovalores $+1$ e -1 , respectivamente. Podemos associar o estado $|\uparrow\rangle$ com um modo de estado vácuo no espaço de Fock $|0\rangle$, e o estado $|\downarrow\rangle$ com um modo de estado ocupado $|1\rangle$. No espaço de um único qubit, o primeiro mapa entre operadores surge:

$$\sigma_i^z = 1 - 2c_i^\dagger c_i. \quad (5.10)$$

Esse operador descrito na Eq. 5.10 possui autovalores 1 ou -1 e atuam nos estados $|0\rangle$ ou $|1\rangle$, da mesma maneira que em um espaço de um qubit.

Este resultado deve ser estendido caso tenhamos mais de um sítio, respeitando-se a relação de anticomutação para férmions. Com o objetivo de generalizarmos o sistema para mais partículas, notamos primeiro que a operação de aniquilação c_i é equivalente à operação σ_i^+ , que inverte a direção do *spin* de baixo para cima (e a operação de criação c_i^\dagger é equivalente a inverter a direção do *spin* de cima para baixo σ_i^-). Entretanto, para satisfazer as *relações de anticomutação canônicas para férmions*, adicionamos uma *string* de σ_j^z operadores que atuam em todos os sítios antes de chegarmos ao i -ésimo sítio e, desse modo, definimos a transformação de Jordan Wigner:

$$c_i = \left(\prod_{j<i} \sigma_j^z \right) \sigma_i^+; \quad c_i^\dagger = \left(\prod_{j<i} \sigma_j^z \right) \sigma_i^-. \quad (5.11)$$

Utilizando-se a Eq. 5.10, esta transformação pode ser invertida,

$$\sigma_i^+ = \prod_{j<i} (1 - 2c_j^\dagger c_j) c_i; \quad \sigma_i^- = \prod_{j<i} (1 - 2c_j^\dagger c_j) c_i^\dagger. \quad (5.12)$$

Com isso, podemos facilmente escrever o mapa dos operadores σ_i^x como:

$$\sigma_i^x = \prod_{j<i} (1 - 2c_j^\dagger c_j) (c_i + c_i^\dagger). \quad (5.13)$$

As relações de anticomutação canônicas para férmions² são dadas pelas Eqs. 5.14a e 5.14b:

$$\{c_j, c_k^\dagger\} = \delta_{jk} \mathbb{I}, \quad (5.14a)$$

$$\{c_j, c_k\} = 0. \quad (5.14b)$$

Essas relações são satisfeitas por construção. Agora podemos aplicar a transformação de Jordan-Wigner à Eq. 5.5 termo a termo, com o objetivo de transformar o hamiltoniano original em um hamiltoniano quadrático fermiônico. Faremos isso em cada uma das suas partes, a começar pelo termo que multiplica g :

$$g\sigma_i^z \rightarrow g(1 - 2c_i^\dagger c_i) = g(c_i c_i^\dagger + c_i^\dagger c_i - 2c_i c_i^\dagger) = g(c_i^\dagger c_i - c_i c_i^\dagger), \quad (5.15)$$

onde utilizamos as relações de anticomutação canônicas para férmions (5.14a e 5.14b).

Devido ao fato das condições de contorno periódicas, o termo de interação σ^x deve ser tratado separadamente para os casos $i < N$ e $i = N$. Quando $i < N$, temos:

$$\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rightarrow \left[\prod_{j<i} (1 - 2c_j^\dagger c_j) (1 - 2c_j^\dagger c_j) \right] \left[(c_i + c_i^\dagger) (1 - 2c_i^\dagger c_i) \right] \left[c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger \right]. \quad (5.16)$$

O dois primeiros colchetes são calculados abaixo. Note que aqui usamos as relações de anticomutação canônicas para férmions:

$$\begin{aligned} (1 - 2c_j^\dagger c_j) (1 - 2c_j^\dagger c_j) &= 1 - 4c_j^\dagger c_j + 4c_j^\dagger c_j c_j^\dagger c_j, \\ &= 1 - 4c_j^\dagger c_j + 4c_j^\dagger c_j (1 - c_j c_j^\dagger), \\ &= 1 - 4c_j^\dagger c_j + 4c_j^\dagger c_j - 4c_j^\dagger c_j c_j c_j^\dagger = 1; \end{aligned} \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} (c_i + c_i^\dagger) (1 - 2c_i^\dagger c_i) &= c_i - 2c_i c_i^\dagger c_i + c_i^\dagger - 2c_i^\dagger c_i^\dagger c_i, \\ &= c_i + c_i^\dagger - 2c_i (1 - c_i c_i^\dagger), \\ &= c_i + c_i^\dagger - 2c_i + 2c_i c_i c_i^\dagger = c_i^\dagger - c_i. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Podemos reescrever o termo de interação como:

$$\begin{aligned} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x &\rightarrow (c_i^\dagger - c_i) (c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger), \\ &= c_i^\dagger c_{i+1} - c_i c_{i+1}^\dagger - c_i c_{i+1} + c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger \equiv f_{i,i+1}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

²São dadas por anticomutadores $\{\cdot, \cdot\}$. Os anticomutadores são definidos como $\{A, B\} = AB + BA$.

Agora, podemos calcular o caso $i = N$:

$$\sigma_N^x \sigma_1^x \rightarrow \left[\prod_{j < N} (1 - 2c_j^\dagger c_j) \right] (1) (c_N + c_N^\dagger) (c_1 + c_1^\dagger), \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned} \sigma_N^x \sigma_1^x &\rightarrow \left[\prod_{j < N} (1 - 2c_j^\dagger c_j) \right] (1) (c_N + c_N^\dagger) (c_1 + c_1^\dagger), \\ &= \left[\prod_{j < N} (1 - 2c_j^\dagger c_j) \right] (1 - 2c_N^\dagger c_N) (1 - 2c_N^\dagger c_N) (c_N^\dagger c_1 + c_N c_1^\dagger + c_N^\dagger c_1^\dagger + c_N c_1), \\ &= \left[\prod_{j=1}^N (1 - 2c_j^\dagger c_j) \right] (1 - 2c_N^\dagger c_N) (c_N^\dagger c_1 + c_N c_1^\dagger + c_N^\dagger c_1^\dagger + c_N c_1) = \\ &= P (c_N^\dagger c_1 + c_N c_1^\dagger + c_N^\dagger c_1^\dagger + c_N c_1 - 2c_N^\dagger c_1 - 2c_N^\dagger c_1^\dagger) = -P f_{N,1}, \end{aligned} \quad (5.21)$$

onde inserimos um operador identidade. O operador de paridade é definido como:

$$P = \prod_{i=1}^N (1 - 2c_i^\dagger c_i). \quad (5.22)$$

Com essas manipulações todas, o hamiltoniano é dado por:

$$H(g) = - \sum_{i=1}^{N-1} f_{i,i+1} + P f_{N,1} - g \sum_{i=1}^N (c_i c_i^\dagger - c_i^\dagger c_i). \quad (5.23)$$

O operador de paridade P pode assumir os valores ± 1 se houver um número par/ímpar de férmions. Também podemos ver que $[H, P] = 0$, o que implica que podemos diagonalizar ambos os operadores na mesma base. Como o hamiltoniano H só possui termos que criam ou aniquilam férmions em pares, a paridade do número de férmions é conservada. Esse resultado nos permite tratar cada um desses subespaços separadamente, diagonalizando o hamiltoniano em blocos que respeitam cada uma das simetrias de paridade. Sejam P_+ e P_- projetores no subespaço com número par ou ímpar de férmions, respectivamente, definidos por:

$$P^+ = \frac{\mathbb{I} + P}{2}, \quad P^- = \frac{\mathbb{I} - P}{2}. \quad (5.24)$$

Utilizando-se os projetores dados pela Eq. 5.24, podemos escrever:

$$\begin{aligned} H &= \mathbb{I} H \mathbb{I} = (P_+ + P_-) H (P_+ + P_-) = P_+ H P_+ + P_+ H P_- + P_- H P_+ + P_- H P_-, \\ H &= P_+ H P_+ + P_- H P_- = H^+ + H^-, \end{aligned} \quad (5.25)$$

onde H_+ e H_- são as projeções do hamiltoniano em cada um dos subespaços. Para o caso $P = +1$, definimos condições de contorno antiperiódicas $c_{N+1} = -c_1$, com o objetivo de reescrever o hamiltoniano H em um modo mais compacto, com o termo de fronteira na

soma. De maneira inversa, o caso $P = -1$ determina condições de contorno periódicas $c_{N+1} = c_1$ e, desse modo, H^\pm podem ser escritos como a Eq. 5.26:

$$H^\pm = -\sum_{i=1}^N [f_{i,i+1} + g(c_i c_i^\dagger - c_i^\dagger c_i)], \quad (5.26)$$

$$\text{onde: } \begin{cases} H^+ \rightarrow c_{N+1} = -c_1, \\ H^- \rightarrow c_{N+1} = c_1. \end{cases} \quad (5.27)$$

Embora comecemos com condições de contorno periódicas, a transformação de Jordan-Wigner mapeou o hamiltoniano do sistema em dois hamiltonianos fermiônicos sem *spin* H^\pm com a mesma forma, entretanto, com diferentes condições de contorno. Conforme demonstrado em [127], no limite termodinâmico, esses dois subespaços possuem exatamente a mesma energia, e essa degenerescência se origina quando ocorre a quebra espontânea de simetria ($0 < g < 1$). Agora iremos descrever como o hamiltoniano H pode ser diagonalizado em cada um desses subespaços (par e ímpar).

5.2.2.a Subespaço de paridade par

No subespaço de paridade par, temos que lidar com condições de contorno anti-periódicas para respeitar a ação do operador de paridade na cadeia de *spins*. O próximo passo é realizar uma Transformada Discreta de Fourier antiperiódica, adequada para este problema. Obviamente, tal transformação deve ser realizada independentemente nas cadeias de *spins* tamanhos pares e ímpares.

5.2.2.a.1 Número par de sítios

No caso do número de sítios par, realizaremos a transformada de Fourier discreta direta³ dada por:

$$c_j = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikj} c_k, \quad c_j^\dagger = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikj} c_k^\dagger, \quad (5.28)$$

onde os momentos k são somados sobre o seguinte conjunto de índices:

$$k = \left\{ \pm \frac{\pi}{N}, \pm \frac{3\pi}{N}, \dots, \pm \left(\pi - \frac{\pi}{N} \right) \right\}. \quad (5.29)$$

Este novo conjunto de operadores c_k refere-se ao espaço de momentos, enquanto c_j refere-se ao espaço real, e a variável k é um sub-índice que percorre os valores de momentos necessários para descrevê-los completamente. Essa soma garante que as condições de contorno antiperiódicas sejam satisfeitas. Podemos facilmente escrever a transformada de

³Aqui escolhemos utilizar os mesmos símbolos para a transformada de Fourier discreta direta e a transformada de Fourier discreta inversa, por simplicidade. A transformada direta utiliza-se dos índices j e a inversa dos índices k .

Fourier discreta inversa simplesmente multiplicando-se o lado esquerdo da Eq. 5.28 por $e^{-ik'j}$ e somando-se no outro índice.

$$\begin{aligned} \sum_j e^{-ik'j} c_j &= \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{N}} \sum_k \sum_j e^{ikj} e^{-ik'j} c_k, \\ \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ik'j} c_j &= \sum_k c_k \left[\frac{1}{N} \sum_j e^{i(k-k')j} \right] = \sum_k c_k \delta_{k,k'} = c_{k'}, \\ c_k &= \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikj} c_j \rightarrow c_k^\dagger = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikj} c_j^\dagger. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Podemos observar que este novo conjunto de operadores satisfaz as relações de anticomutação canônicas para férmions:

$$\begin{aligned} \{c_k, c_{k'}^\dagger\} &= \frac{1}{N} \sum_{jj'} e^{-ikj} e^{ik'j'} c_j c_{j'}^\dagger + \frac{1}{N} \sum_{jj'} e^{-ikj} e^{ik'j'} c_{j'}^\dagger c_j, \\ &= \frac{1}{N} \sum_{jj'} e^{-ikj} e^{ik'j'} \{c_j, c_{j'}^\dagger\} = \frac{1}{N} \sum_{jj'} e^{-ikj} e^{ik'j'} \delta_{j,j'} I, \\ &= \frac{1}{N} \sum_j e^{-ikj} e^{ik'j} I = \left(\frac{1}{N} \sum_j e^{-i(k-k')j} \right) I = \delta_{k,k'} I, \\ \{c_k, c_{k'}\} &= \frac{1}{N} \sum_{jj'} e^{-ikj} e^{-ik'j'} \{c_j, c_{j'}\} = 0. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Denotamos por H_{even}^+ o subespaço de Paridade Positiva do hamiltoniano que possui um número par de partículas e aplicamos a transformada de Fourier discreta, definida acima na Eq. 5.28 em cada um de seus termos, a começar por aqueles que dependam apenas do i -ésimo sítio:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N c_i c_i^\dagger &= \sum_{i=1}^N \sum_{kk'} \frac{1}{N} e^{ikj} e^{-ik'j} c_k c_{k'}^\dagger, \\ &= \sum_{kk'} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{i(k-k')j} \right) c_k c_{k'}^\dagger, \\ &= \sum_{kk'} c_k c_{k'}^\dagger \delta_{k,k'} = \sum_k c_k c_k^\dagger. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Portanto, podemos observar que:

$$\sum_{i=1}^N c_i^\dagger c_i = \left(\sum_{i=1}^N c_i c_i^\dagger \right)^\dagger = \sum_k c_k^\dagger c_k. \quad (5.33)$$

Os termos que dependem de $(i, i+1)$ são calculados de maneira semelhante. Observe que dividimos explicitamente a última soma em momentos de duas maneiras diferentes,

contudo, equivalentes:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^N c_i^\dagger c_{i+1} &= \sum_{i=1}^N \sum_{kk'} \frac{1}{N} e^{-ikj} e^{ik'(j+1)} c_k^\dagger c_{k'}, \\
 &= \sum_{kk'} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{i(k'-k)j} \right) e^{ik'} c_k^\dagger c_{k'}, \\
 &= \sum_{kk'} e^{ik'} c_k^\dagger c_{k'} \delta_{k,k'}, \\
 \sum_{i=1}^N c_i^\dagger c_{i+1} &= \frac{1}{2} \sum_k e^{ik} c_k^\dagger c_k - \frac{1}{2} \sum_k e^{-ik} c_{-k} c_{-k}^\dagger.
 \end{aligned} \tag{5.34}$$

Portanto, teremos:

$$\sum_{i=1}^N c_i c_{i+1}^\dagger = \left(- \sum_{i=1}^N c_i^\dagger c_{i+1} \right)^\dagger = \frac{1}{2} \sum_k e^{-ik} c_k^\dagger c_k - \frac{1}{2} \sum_k e^{ik} c_{-k} c_{-k}^\dagger, \tag{5.35}$$

e, desse modo, somando-se os dois termos, obtemos:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^N c_i^\dagger c_{i+1} + c_i c_{i+1}^\dagger &= \sum_k \frac{e^{ik} + e^{-ik}}{2} c_k^\dagger c_k - \sum_k \frac{e^{ik} + e^{-ik}}{2} c_{-k} c_{-k}^\dagger, \\
 &= \sum_k \cos(k) c_k^\dagger c_k - \cos(k) c_{-k} c_{-k}^\dagger.
 \end{aligned} \tag{5.36}$$

Finalmente, avaliamos os termos que criam e aniquilam férmions em pares, usando manipulações semelhantes:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^N c_i c_{i+1} &= \sum_{i=1}^N \sum_{kk'} \frac{e^{-i\pi/2}}{N} e^{ikj} e^{ik'(j+1)} c_k^\dagger c_{k'}, \\
 &= -i \sum_{kk'} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{i(k'+k)j} \right) e^{ik'} c_k c_{k'}, \\
 &= -i \sum_{kk'} e^{-ik'} c_k c_{k'} \delta_{k,-k'} = -i \left[\frac{1}{2} \sum_k e^{-ik} c_k c_{-k} + \frac{1}{2} \sum_k e^{ik} c_{-k} c_k \right], \\
 &= -i \left[\frac{1}{2} \sum_k e^{-ik} c_k c_{-k} - \frac{1}{2} \sum_k e^{ik} c_k c_{-k} \right], \\
 &= \sum_k \sin(k) c_k c_{-k}.
 \end{aligned} \tag{5.37}$$

Portanto, teremos:

$$\sum_{i=1}^N c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger = \left(\sum_{i=1}^N c_i c_{i+1} \right)^\dagger = \sum_k \sin(k) c_{-k}^\dagger c_k^\dagger = - \sum_k \sin(k) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger. \tag{5.38}$$

Ao juntarmos todas as peças aqui, iremos obter:

$$\begin{aligned}
 H_{even}^+ &= \sum_k \left[(g - \cos(k)) (c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger) + \sin(k) (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_{-k} c_k) \right], \\
 H_{even}^+ &\equiv \sum_k h_k.
 \end{aligned} \tag{5.39}$$

Até agora, transformamos o hamiltoniano inicial em um hamiltoniano quadrático com operadores fermiônicos no espaço de momentos. A equação acima Eq. 5.39 possui uma forma muito especial, e algumas manipulações na soma dos momentos nos permitiram escrevê-la com algumas funções trigonométricas, mas ainda não seria diagonal como desejamos.

Neste momento, temos que realizar o último passo definindo novos operadores fermiônicos em uma forma diagonal. Primeiramente, observe que esta equação pode ser escrita de uma maneira mais compacta se utilizarmos um vetor em que cada entrada não significa um simples número, mas um operador:

$$\begin{aligned} H_{even}^+ &= \sum_k \begin{bmatrix} c_k^\dagger & c_{-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g - \cos(k) & \sin(k) \\ \sin(k) & -(g - \cos(k)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{bmatrix}, \\ &\equiv \sum_k \begin{bmatrix} c_k^\dagger & c_{-k} \end{bmatrix} M_k \begin{bmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (5.40)$$

A próxima etapa do processo de diagonalização do hamiltoniano consiste na transformação de Bogoliubov, que corresponde a uma rotação dos operadores c_k . Isto é realizado definindo-se novos operadores $\{\gamma_k, \gamma_k^\dagger\}$, tais que: 1. o operador transformado M_k possua uma forma diagonal e tais que 2. estes novos operadores γ_k satisfaçam as mesmas relações de anticomutação canônicas. Definimos essa transformação de Bogoliubov e a sua inversa nas Eqs. 5.41 e 5.43 abaixo. Também é óbvio que elas satisfazem ambas as condições:

$$c_k = \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \gamma_k - \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \gamma_{-k}^\dagger, \quad (5.41)$$

$$\gamma_k = \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) c_k + \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) c_{-k}^\dagger, \quad (5.42)$$

onde,

$$\begin{aligned} (\sin(\theta_k), \cos(\theta_k)) &= \left(\frac{\sin(k)}{\epsilon_k}, \frac{g - \cos(k)}{\epsilon_k} \right), \\ \epsilon_k &= \sqrt{[g - \cos(k)]^2 + \sin^2(k)}. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Com essa definição, podemos observar que a segunda condição é satisfeita:

$$\begin{aligned} \{\gamma_k, \gamma_{k'}^\dagger\} &= \left(\cos(\theta_k/2)c_k + \sin(\theta_k/2)c_{-k}^\dagger \right) \left(\cos(\theta_{k'}/2)c_{k'}^\dagger + \sin(\theta_{k'}/2)c_{-k'} \right) \\ &\quad + \left(\cos(\theta_{k'}/2)c_{k'}^\dagger + \sin(\theta_{k'}/2)c_{-k'} \right) \left(\cos(\theta_k/2)c_k + \sin(\theta_k/2)c_{-k}^\dagger \right), \\ &= \cos(\theta_k/2) \cos(\theta_{k'}/2) \{c_k, c_{k'}^\dagger\} + \sin(\theta_k/2) \sin(\theta_{k'}/2) \{c_{-k'}, c_{-k}^\dagger\} \\ &\quad + \sin(\theta_k/2) \cos(\theta_{k'}/2) \{c_{-k}^\dagger, c_{k'}^\dagger\} + \cos(\theta_k/2) \sin(\theta_{k'}/2) \{c_k, c_{-k'}\}, \\ &= (\cos(\theta_k/2) \cos(\theta_{k'}/2) + \sin(\theta_k/2) \sin(\theta_{k'}/2)) \delta_{k,k'} \mathbb{I}, \\ &= \delta_{k,k'} \mathbb{I}. \end{aligned} \quad (5.44)$$

A outra condição das relações de anticomutação canônicas são verificadas da mesma maneira. Esse novo conjunto de operadores satisfaz as mesmas relações de anticomutação

fermiônicas:

$$\begin{aligned}\{\gamma_k, \gamma_{k'}^\dagger\} &= \delta_{k,k'} \mathbb{I}, \\ \{\gamma_k, \gamma_{k'}\} &= 0.\end{aligned}\tag{5.45}$$

Deste modo, calcularemos diretamente o hamiltoniano transformado e mostraremos que ele satisfaz a primeira condição, o que resolveria o nosso problema para esse subespaço. A transformação de Bogoliubov definida pelas Eqs. 5.41 e 5.43 também pode ser escrita em uma forma matricial mais conveniente:

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos(\theta_k/2) & -\sin(\theta_k/2) \\ \sin(\theta_k/2) & \cos(\theta_k/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_k \\ \gamma_{-k}^\dagger \end{bmatrix} \\ &\equiv T \begin{bmatrix} \gamma_k \\ \gamma_{-k}^\dagger \end{bmatrix}.\end{aligned}\tag{5.46}$$

Se utilizarmos as definições dadas pela Eq. 5.43, iremos reescrever M_k como:

$$\begin{aligned}M_k &= \sqrt{[g - \cos(k)]^2 + \sin^2(k)} \begin{bmatrix} \cos(\theta_k) & \sin(\theta_k) \\ \sin(\theta_k) & -\cos(\theta_k) \end{bmatrix} \\ &\equiv \epsilon_k \begin{bmatrix} \cos(\theta_k) & \sin(\theta_k) \\ \sin(\theta_k) & -\cos(\theta_k) \end{bmatrix}.\end{aligned}\tag{5.47}$$

Agora, torna-se imediato escrevermos o H_{even}^+ transformado. Vamos definir \tilde{M}_k como a nova matriz:

$$\begin{aligned}\tilde{M}_k &= \begin{bmatrix} \cos(\theta_k/2) & \sin(\theta_k/2) \\ -\sin(\theta_k/2) & \cos(\theta_k/2) \end{bmatrix} M_k \begin{bmatrix} \cos(\theta_k/2) & -\sin(\theta_k/2) \\ \sin(\theta_k/2) & \cos(\theta_k/2) \end{bmatrix} \\ &= T^\dagger M_k T,\end{aligned}\tag{5.48}$$

$$\tilde{M}_k = \epsilon_k \begin{bmatrix} \cos(\theta_k/2) & \sin(\theta_k/2) \\ -\sin(\theta_k/2) & \cos(\theta_k/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta_k) & \sin(\theta_k) \\ \sin(\theta_k) & -\cos(\theta_k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta_k/2) & -\sin(\theta_k/2) \\ \sin(\theta_k/2) & \cos(\theta_k/2) \end{bmatrix}.\tag{5.49}$$

Calculamos cada um dos seus elementos:

$$\begin{aligned}[\tilde{M}_k]_{11} &= [\cos^2(\theta_k/2) - \sin^2(\theta_k/2)] \cos(\theta_k) + 2 \sin(\theta_k/2) \cos(\theta_k/2) \sin(\theta_k), \\ &= \cos^2(\theta_k) + \sin^2(\theta_k) = 1, \\ [\tilde{M}_k]_{22} &= -[\tilde{M}_k]_{11}, \\ [\tilde{M}_k]_{12} &= [\cos^2(\theta_k/2) - \sin^2(\theta_k/2)] \sin(\theta_k) - 2 \sin(\theta_k/2) \cos(\theta_k/2) \cos(\theta_k), \\ &= \cos(\theta_k) \sin(\theta_k) - \sin(\theta_k) \cos(\theta_k) = 0, \\ [\tilde{M}_k]_{21} &= [\tilde{M}_k]_{12},\end{aligned}\tag{5.50}$$

onde aqui usamos as seguintes identidades trigonométricas:

$$\begin{aligned}\cos^2(\alpha) - \sin^2(\alpha) &= \cos(2\alpha), \\ \sin(\alpha) \cos(\alpha) &= \frac{1}{2} \sin(2\alpha).\end{aligned}\tag{5.51}$$

Por fim, podemos observar o resultado final:

$$\begin{aligned}
 H_{even}^+ &= \sum_k \epsilon_k \begin{bmatrix} \gamma_k^\dagger & \gamma_{-k} \end{bmatrix} \tilde{M}_k \begin{bmatrix} \gamma_k \\ \gamma_{-k}^\dagger \end{bmatrix}, \\
 &= \sum_k \epsilon_k \begin{bmatrix} \gamma_k^\dagger & \gamma_{-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_k \\ \gamma_{-k}^\dagger \end{bmatrix}, \\
 &= \sum_k \epsilon_k (\gamma_k^\dagger \gamma_k - \gamma_{-k} \gamma_{-k}^\dagger), \\
 &= \sum_K \epsilon_k (\gamma_k^\dagger \gamma_k + \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k} - 1) = \sum_k \epsilon_k (2\gamma_k^\dagger \gamma_k - 1).
 \end{aligned} \tag{5.52}$$

O estado fundamental desse hamiltoniano é aquele que é aniquilado pelos operadores γ_k e, portanto, minimiza a energia:

$$\gamma_k |GS_{even}^+\rangle = 0; \quad \forall k. \tag{5.53}$$

Isso pode ser escrito como:

$$|GS^+\rangle = \prod_{k>0} \left(\cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) - \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger \right) |vac\rangle, \tag{5.54}$$

onde $|vac\rangle$ é aniquilado por todos operadores c_k . Sua energia é, simplesmente,

$$\epsilon_{even}^+ = - \sum_k \epsilon_k. \tag{5.55}$$

5.2.2.a.2 Número ímpar de sítios

Considerando-se um número ímpar de sítios, a transformada de Fourier discreta que realizamos é a mesma definida em 5.28, entretanto, a soma realizada é sobre o conjunto de momentos dados por:

$$k = \left\{ \pm \frac{\pi}{N}, \pm \frac{3\pi}{N}, \dots, \pm \left(\pi - \frac{2\pi}{N} \right), \pi \right\}. \tag{5.56}$$

Observe que o único valor de momento sem a contrapartida negativa é $k = \pi$, e, desse modo, podemos utilizar a Eq. 5.39 explicitamente, se retirarmos a contribuição do momento ausente $k = \pi$ da soma. A mesma transformação de Bogoliubov deve ser aplicada e o hamiltoniano com essa transformação torna-se ligeiramente diferente:

$$H_{odd}^+ = \sum_{k \neq \pi} h_k + (g+1)(c_\pi^\dagger c_\pi - c_\pi c_\pi^\dagger). \tag{5.57}$$

Neste subespaço, temos um número par de “quase-partículas”, o que implica que devemos ter o modo $k = \pi$ vazio. O estado fundamental é escrito da mesma forma que calculamos antes na Eq. 5.54, mas observe que agora temos o modo $k = \pi$ na soma. Sua energia é:

$$\epsilon_{odd}^+ = - \sum_{k \neq \pi} \epsilon_k - (g+1). \tag{5.58}$$

5.2.2.b Subespaço de paridade ímpar

5.2.2.b.1 Número par de sítios

Nesse subespaço, a transformada de Fourier discreta é somada sobre o seguinte conjunto de momentos:

$$k = \left\{ 0, \pm \frac{2\pi}{N}, \pm \frac{4\pi}{N}, \dots, \pm \left(\pi - \frac{2\pi}{N} \right), \pi \right\}. \quad (5.59)$$

com o objetivo de garantir que as condições de contorno periódicas sejam satisfeitas, de maneira semelhante ao caso anterior, a mesma discussão acima se aplica, entretanto, agora temos os modos $k = 0$ e $k = \pi$ que não aparecem na soma. Os outros modos são diagonalizados pela mesma transformação de Bogoliubov:

$$H_{even}^- = \sum_{k \neq 0, \pi} h_k + (g - 1) (c_0^\dagger c_0 - c_0 c_0^\dagger) + (g + 1) (c_\pi^\dagger c_\pi - c_\pi c_\pi^\dagger). \quad (5.60)$$

Neste subespaço, temos um número par de “quase-partículas”, o que implica que o estado fundamental terá o modo $k = 0$ ou $k = \pi$ excitado. Com o intuito de minimizar a energia, o modo $k = 0$ é o ocupado e, portanto, temos:

$$|GS^-\rangle = c_0 \prod_{k > 0} \left(\cos \left(\frac{\theta_k}{2} \right) - \sin \left(\frac{\theta_k}{2} \right) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger \right) |vac\rangle, \quad (5.61)$$

$$\varepsilon_{even}^- = - \sum_{k \neq 0, \pi} \epsilon_k - 2. \quad (5.62)$$

5.2.2.b.2 Número ímpar de sítios

Realizamos a mesma transformada de Fourier discreta, entretanto, agora utilizamos o seguinte conjunto de momentos

$$k = \left\{ 0, \pm \frac{2\pi}{N}, \pm \frac{4\pi}{N}, \dots, \pm \left(\pi - \frac{\pi}{N} \right) \right\}, \quad (5.63)$$

e o hamiltoniano é

$$H_{odd}^- = \sum_{k \neq 0} h_k + (g - 1) (c_0^\dagger c_0 - c_0 c_0^\dagger). \quad (5.64)$$

Conforme realizado anteriormente, aplicamos a transformação de Bogoliubov na parte em que $k \neq 0$, entretanto, agora temos um número par de “quase-partículas” e, então, o modo $k = 0$ deve ser ocupado. Podemos escrever o estado fundamental como na Eq. 5.61 com a soma dos momentos definida acima, e com energia dada por:

$$\varepsilon_{odd}^- = - \sum_{k \neq 0} \epsilon_k + g - 1. \quad (5.65)$$

5.3 Estado fundamental do modelo de Ising quântico $1D$ no espaço de Hilbert

Nas últimas seções, vimos que o estado fundamental do modelo de Ising quântico $1D$ pôde ser escrito em diferentes subespaços, de acordo com a sua simetria de paridade e a paridade do número (tamanho do sistema N). Além disso, o estado fundamental no subespaço de paridade positiva com tamanhos pares/ímpares é muito semelhante, e a única diferença reside no grau de liberdade de cada estado de vácuo. O mesmo ocorre com o subespaço de paridade negativa com tamanhos pares/ímpares.

Nesta seção, usaremos a transformada de Fourier discreta inversa definida na Eq. 5.30 e a transformação de Jordan-Wigner inversa na Eq. 5.11 para escrever um setor do estado fundamental (paridade positiva) no espaço de Hilbert de *spins*. Com o objetivo de se obter o estado fundamental Ising no espaço de *qubits*, começamos com a aplicação da transformada de Fourier discreta e a transformação de Jordan-Wigner inversa no operador:

$$\begin{aligned} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger &= \frac{e^{-i\pi/2}}{N} \sum_{j,j'} e^{ik(j-j')} c_j^\dagger c_{j'}^\dagger, \\ &= \frac{-i}{N} \sum_{j,j'} e^{ik(j-j')} \left[\left(\prod_{l<j} \sigma_l^z \right) \sigma_j^- \right] \left[\left(\prod_{l'<j'} \sigma_{l'}^z \right) \sigma_{j'}^- \right]. \end{aligned} \quad (5.66)$$

Dividimos esta equação em três situações, quando $j = j'$

$$j = j' \rightarrow \frac{-i}{N} \sum_{j=j'} \left(\prod_{l<j} \sigma_l^z \sigma_l^z \right) \sigma_j^- \sigma_j^- = 0, \quad (5.67)$$

quando $j > j'$, iremos obter:

$$\begin{aligned} j > j' &\rightarrow \frac{-i}{N} \sum_{j>j'} e^{ik(j-j')} \left(\prod_{l<j'} \sigma_l^z \sigma_l^z \right) \sigma_{j'}^z \sigma_{j'}^- \left(\prod_{j'<l'<j} \sigma_{l'}^z \right) \sigma_j^-, \\ &= \frac{-i}{N} \sum_{j>j'} e^{ik(j-j')} (-\sigma_{j'}^-) \left(\prod_{j'<l'<j} \sigma_{l'}^z \right) \sigma_j^-, \end{aligned} \quad (5.68)$$

e, quando $j < j'$, o que consiste em um caso idêntico ao caso $j > j'$, apenas com apenas um sinal negativo a mais teremos:

$$\begin{aligned} j < j' &\rightarrow \frac{-i}{N} \sum_{j<j'} e^{ik(j-j')} \left(\prod_{l<j} \sigma_l^z \sigma_l^z \right) \sigma_j^- \sigma_j^z \left(\prod_{j'<l'<j'} \sigma_{l'}^z \right) \sigma_{j'}^-, \\ &= \frac{-i}{N} \sum_{j<j'} e^{ik(j-j')} (\sigma_j^-) \left(\prod_{j'<l'<j'} \sigma_{l'}^z \right) \sigma_{j'}^-, \\ j > j' &\rightarrow \frac{-i}{N} \sum_{j>j'} e^{-ik(j-j')} (\sigma_{j'}^-) \left(\prod_{j'<l'<j} \sigma_{l'}^z \right) \sigma_j^-, \end{aligned} \quad (5.69)$$

onde, na última linha, mudamos o índice mudo $j \leftrightarrow j'$. Desse modo, escrevemos a soma como:

$$\begin{aligned} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger &\rightarrow \frac{-i}{N} \sum_{j>j'} [e^{-ik(j-j')} - e^{ik(j-j')}] \sigma_{j'}^- \left(\prod_{j'<l<j} \sigma_l^z \right) \sigma_j^-, \\ &= -\frac{2}{N} \sum_{j>j'} \sin[k(j-j')] \sigma_{j'}^- \left(\prod_{j'<l<j} \sigma_l^z \right) \sigma_j^-. \end{aligned} \quad (5.70)$$

Podemos notar que, com esta transformação, o operador $c_k^\dagger c_{-k}^\dagger$ pode ser imaginado como um operador que atua diminuindo dois *spins* na cadeia, o que incluiria um fator de fase extra $\sin[k(j-j')]$, que depende da distância entre os sítios e, também, de um fator de sinal ± 1 , a depender do número de vetores *spins* invertidos no meio. O estado de vácuo na representação do espaço de rotação é apenas um estado de produto de $|\uparrow\rangle$, conforme mencionado anteriormente na definição da transformação de Jordan-Wigner. Portanto, o estado fundamental desta parte pode ser escrito como:

$$|GS_{even}^+\rangle = \prod_{k>0} \left[\cos(\theta_k/2) + \frac{2}{N} \sin(\theta_k/2) \sum_{j>j'} \sin[k(j-j')] \sigma_{j'}^- \left(\prod_{j'<l<j} \sigma_l^z \right) \sigma_j^- \right] |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle. \quad (5.71)$$

A Eq. 5.71 possui um produtório de uma soma de operadores cuja ação no seguinte estado do produto $|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle$ inverte um número par de *spins* ou aplica a identidade (com algum fator de fase global em cada caso). Portanto, o estado resultante é uma superposição de estados-produto que possuem essa mesma simetria: um produto de *spins* “para cima” com um número par de *spins* “para baixo” (além de todas as permutações possíveis), ou o produto tensorial de $|\uparrow\rangle$ para todo local. Os coeficientes de cada elemento de superposição são bastante difíceis de se determinar, pois há muitas permutações possíveis dos operadores na Eq. 5.71. A primeira tentativa de determinar esses coeficientes é mapear a base formada pelos elementos de superposição para uma *string* de 0's e 1's com a seguinte correspondência:

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &\rightarrow [0], \\ |\downarrow\rangle &\rightarrow [1]. \end{aligned} \quad (5.72)$$

Em princípio, poder-se-ia enumerar todas as strings possíveis formadas por um número par de 1's e usar este conjunto para fazer uma correspondência com os estados do espaço de Hilbert. Entretanto, tal algoritmo seria muito ineficiente à medida que o número de rodadas aumenta.

5.4 Matriz densidade reduzida de um *qubit* na base de Bloch para o modelo de Ising quântico $1D$ no limite termodinâmico

Na Sec. 5.3, consideramos o estado fundamental no espaço de *spin*. Apesar de simples, não é muito prático lidar analiticamente com o estado escrito nesta forma, pois temos um produto de uma soma de produtos tensoriais extremamente não locais de matrizes Pauli. Mas podemos calcular a matriz reduzida de um *spin* utilizando-se da representação de 1 *qubit* na base de Bloch. Os coeficientes do vetor de Bloch são obtidos via valor esperado. Desse modo, o último operador γ_k é escolhido de tal forma que o estado fundamental seja o estado de vácuo. A representação de Bloch de um operador de matriz densidade pode ser escrita como:

$$\rho_1(j) = \frac{\mathbb{I}}{2} + \frac{\vec{r}_j \cdot \vec{\sigma}_j}{2}, \quad (5.73)$$

onde $r_j^a = \langle \sigma_j^a \rangle$ é o valor esperado do sítio j , e $a = x, y, z$. Não é muito difícil observar que $\langle \sigma_j^x \rangle = 0$ e $\langle \sigma_j^y \rangle = 0 \quad \forall j$, devido ao fato de ser composto por um número ímpar de férmions. Portanto,

$$\begin{aligned} \sigma_j^z &= 1 - 2c_j^\dagger c_j, \\ &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} c_k^\dagger c_{k'}, \\ &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} \left(\cos(\theta_k/2) \gamma_k^\dagger - \sin(\theta_k/2) \gamma_{-k} \right) \left(\cos(\theta_{k'}/2) \gamma_{k'} - \sin(\theta_{k'}/2) \gamma_{-k'}^\dagger \right), \\ \sigma_j^z &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} \left(\cos(\theta_k/2) \cos(\theta_{k'}/2) \gamma_k^\dagger \gamma_{k'} - \cos(\theta_k/2) \sin(\theta_{k'}/2) \gamma_k^\dagger \gamma_{-k'}^\dagger + \right. \\ &\quad \left. - \sin(\theta_k/2) \cos(\theta_{k'}/2) \gamma_{-k} \gamma_{k'} + \sin(\theta_k/2) \sin(\theta_{k'}/2) \gamma_{-k} \gamma_{-k'}^\dagger \right). \end{aligned} \quad (5.74)$$

Podemos notar que o único termo não-nulo é aquele com operador de aniquilação à esquerda e operador de criação à direita, o que resulta em um delta de Kronecker como resultado:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_j^z \rangle &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} \left(\cos(\theta_k/2) \cos(\theta_{k'}/2) \langle \gamma_k^\dagger \gamma_{k'} \rangle - \cos(\theta_k/2) \sin(\theta_{k'}/2) \langle \gamma_k^\dagger \gamma_{-k'}^\dagger \rangle + \right. \\ &\quad \left. - \sin(\theta_k/2) \cos(\theta_{k'}/2) \langle \gamma_{-k} \gamma_{k'} \rangle + \sin(\theta_k/2) \sin(\theta_{k'}/2) \langle \gamma_{-k} \gamma_{-k'}^\dagger \rangle \right), \\ \langle \sigma_j^z \rangle &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} \sin(\theta_k/2) \sin(\theta_{k'}/2) \delta_{k,k'} = 1 - \frac{2}{N} \sum_k \sin^2(\theta_k/2). \end{aligned} \quad (5.75)$$

O resultado é independente do índice do sítio (como esperado para o sistema invariante de translação) e o estado é então:

$$\rho_1 = \frac{\mathbb{I}}{2} + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_k \sin^2(\theta_k/2) \right) \sigma^z. \quad (5.76)$$

O valor esperado sobre o estado fundamental é dado por:

$$\langle \sigma_j^z \rangle = \langle GS | \sigma_j^z | GS \rangle, \quad (5.77)$$

Substituindo-se $|GS\rangle$ e $\langle GS|$, teremos:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_j^z \rangle &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} \langle vac | \prod_{k_1>0} A_{k_1} (c_k^\dagger c_{k'}) \prod_{k_2>0} A_{k_2}^\dagger | vac \rangle, \\ &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} \langle vac | \left(\prod_{\substack{k_1>0 \\ k_1 \neq k'}} A_{k_1} A_{k_1}^\dagger \right) A_{k'} c_k^\dagger c_{k'} A_{k'}^\dagger | vac \rangle. \end{aligned} \quad (5.78)$$

Deste modo, obteremos:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_j^z \rangle &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} \langle vac | \left(\prod_{\substack{k_1>0 \\ k_1 \neq k'}} A_{k_1} A_{k_1}^\dagger \right) A_{k'} c_k^\dagger \left(-\sin(\theta_{k'}/2) c_{-k'}^\dagger \delta_{k,k'} + A_{k'}^\dagger c_{k'} \right) | vac \rangle, \\ \langle \sigma_j^z \rangle &= 1 + \frac{2}{N} \sum_k \sin(\theta_k/2) \langle vac | \left(\prod_{\substack{k_1>0 \\ k_1 \neq k'}} A_{k_1} A_{k_1}^\dagger \right) A_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger | vac \rangle, \\ \langle \sigma_j^z \rangle &= 1 - \frac{2}{N} \sum_k \sin^2(\theta_k/2) \langle vac | \left(\prod_{\substack{k_1>0 \\ k_1 \neq k'}} A_{k_1} A_{k_1}^\dagger \right) | vac \rangle. \end{aligned} \quad (5.79)$$

Assim, podemos escrever, finalmente:

$$\langle \sigma_j^z \rangle = 1 - \frac{2}{N} \sum_k \sin^2(\theta_k/2). \quad (5.80)$$

Entretanto, podemos escrever também a matriz de densidade reduzida de um *spin*, que será apresentada na Eq. 5.91. Para isso, vamos definir os seguintes operadores:

$$A_k^\dagger \equiv \left(\cos(\theta_k/2) - \sin(\theta_k/2) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger \right), \quad \text{para } k > 0, \quad (5.81)$$

esses operadores satisfazem as seguintes identidades:

$$\begin{aligned} \text{i. } [A_{k_1}, A_{k_2}^\dagger] &= \sin(\theta_{k_1}/2) \sin(\theta_{k_2}/2) [c_{k_1} c_{-k_1}, c_{k_2}^\dagger c_{-k_2}^\dagger], \\ &= \sin(\theta_{k_1}/2) \sin(\theta_{k_2}/2) \left(c_{-k_1} \{c_{k_1}, c_{k_2}^\dagger\} c_{-k_2}^\dagger - c_{-k_1} c_{k_2}^\dagger \{c_{k_1}, c_{-k_2}^\dagger\} \right. \\ &\quad \left. + \{c_{-k_1}, c_{k_2}^\dagger\} c_{-k_2}^\dagger c_{k_1} - c_{k_2}^\dagger \{c_{-k_1}, c_{-k_2}^\dagger\} c_{k_1} \right), \\ &= \sin(\theta_{k_1}/2) \sin(\theta_{k_2}/2) \left(c_{-k_1} c_{-k_2}^\dagger \delta_{k_1, k_2} - c_{-k_1} c_{k_2}^\dagger \delta_{k_1, -k_2} \right. \\ &\quad \left. + c_{-k_2}^\dagger c_{k_1} \delta_{-k_1, k_2} - c_{k_2}^\dagger c_{k_1} \delta_{-k_1, -k_2} \right), \\ &= \sin(\theta_{k_1}/2) \sin(\theta_{k_2}/2) \left(c_{-k_1} c_{-k_2}^\dagger - c_{k_2}^\dagger c_{k_1} \right) \delta_{k_1, k_2}, \quad \forall k_1, k_2 > 0; \end{aligned} \quad (5.82)$$

$$\begin{aligned}
\text{ii. } [c_{k_1}, A_{k_2}^\dagger] &= -\sin(\theta_{k_2}/2) [c_{k_1}, c_{k_2}^\dagger c_{-k_2}^\dagger], \\
&= -\sin(\theta_{k_2}/2) \left(\{c_{k_1}, c_{k_2}^\dagger\} c_{-k_2}^\dagger - c_{k_2} \{c_{k_1}, c_{-k_2}^\dagger\} \right), \\
&= -\sin(\theta_{k_2}/2) \left(c_{-k_2}^\dagger \delta_{k_1, k_2} - c_{k_2}^\dagger \delta_{k_1, -k_2} \right), \\
&= -\sin(\theta_{k_2}/2) c_{-k_2}^\dagger \delta_{k_1, k_2}, \quad \forall k_2 > 0.
\end{aligned} \tag{5.83}$$

$$\begin{aligned}
\text{iii. } [c_{k_1}^\dagger, A_{k_2}^\dagger] &= -\sin(\theta_{k_2}/2) [c_{k_1}^\dagger, c_{k_2}^\dagger c_{-k_2}^\dagger], \\
&= -\sin(\theta_{k_2}/2) \left(\{c_{k_1}^\dagger, c_{k_2}^\dagger\} c_{-k_2}^\dagger - c_{k_2}^\dagger \{c_{k_1}^\dagger, c_{-k_2}^\dagger\} \right), \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{5.84}$$

onde usamos as seguintes identidades:

$$\left\{ \begin{array}{l} [AB, CD] = A[B, CD] + [A, CD]B, \\ [A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\}, \\ \{c_{k_1}, c_{k_2}^\dagger\} = \delta_{k_1, k_2}, \\ \{c_{k_1}, c_{k_2}\} = 0, \\ \{c_{k_1}^\dagger, c_{k_2}^\dagger\} = 0. \end{array} \right. \tag{5.85}$$

Nesta notação, o estado fundamental é escrito como:

$$|GS\rangle = \prod_{k>0} A_k^\dagger |vac\rangle. \tag{5.86}$$

Podemos calcular a matriz densidade reduzida de um *spin*, denotada por ρ_1 e escrevê-la na representação de Bloch. Primeiro, observamos que

$$\sigma^x, \sigma^y \rightarrow \text{mudam a paridade}; \quad \sigma^z, \sigma^0 \rightarrow \text{preservam a paridade}. \tag{5.87}$$

Ao utilizarmos este fato, é relativamente razoável observar que:

$$\begin{aligned}
r_x &= \langle GS | \sigma^x | GS \rangle = 0, \\
r_y &= \langle GS | \sigma^y | GS \rangle = 0,
\end{aligned} \tag{5.88}$$

como σ^x e σ^y alteram a simetria de paridade de $|GS\rangle$, o valor esperado σ^z é calculado no espaço de momentos dos férmions.

Em resumo, conforme vimos nas seções anteriores, o estado fundamental do modelo de Ising pôde ser obtido analiticamente por uma diagonalização que consiste em três etapas [53]:

- Uma transformação de Jordan-Wigner:

$$\sigma_j^z \longrightarrow 1 - 2c_j^\dagger c_j,$$

onde c_j e c_j^\dagger são operadores de criação-aniquilação e respeitam as seguintes relações de anticomutação: $\{c_j, c_k^\dagger\} = \delta_{jk}I$, e $\{c_j, c_k\} = 0$;

- Uma transformada de Fourier discreta:

$$c_j \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} c_k e^{2\pi i(kj)/N};$$

- E uma (rotação), *i.e.*, uma transformação de Bogoliubov:

$$c_k \longrightarrow \cos(\theta_k/2)\gamma_k - \sin(\theta_k/2)\gamma_{-k}^\dagger;$$

onde θ_k representa a rotação da base do modo c_k para uma nova representação do modo γ_k . Os ângulos θ_k são escolhidos de tal forma que o estado fundamental do hamiltoniano na Eq. (5.4) é o estado de vácuo na representação do modo γ_k , em que $\theta_k = \arctan\left(\frac{\sin(k)}{g - \cos(k)}\right)$ [42, 53].

Podemos calcular a matriz de densidade reduzida de um *spin* por meio da matriz reduzida de N *spins* na representação de Bloch, na qual todos os coeficientes são obtidos *via* valores esperados nos operadores de Pauli. O estado de um *qubit* no sítio j , $\rho_j^{(1)}$ pode ser escrito como:

$$\rho_j^{(1)} = \frac{\mathbb{I}}{2} + \frac{\vec{r}_j \cdot \vec{\sigma}_j}{2}, \quad (5.89)$$

onde $r_j^a = \langle \sigma_j^a \rangle$ são os valores esperados no estado de vácuo no sítio j , e $a = x, y, z$. Note que $\langle \sigma_j^x \rangle, \langle \sigma_j^y \rangle = 0, \forall j$, porque consistem em um número ímpar de férmions [53]. Dessa forma, o vetor de Bloch possui somente a componente z . Vamos definir $\theta_k/2 = \beta_k$, e $\theta_{k'}/2 = \beta_{k'}$. Portanto, a componente z será dada por:

$$\begin{aligned} \sigma_j^z &= 1 - 2c_j^\dagger c_j, \\ \sigma_j^z &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} c_k^\dagger c_{k'}, \\ \sigma_j^z &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} \left(\cos(\beta_k)\gamma_k^\dagger - \sin(\beta_k)\gamma_{-k} \right) \left(\cos(\beta_{k'})\gamma_{k'} - \sin(\beta_{k'})\gamma_{-k'}^\dagger \right), \\ \sigma_j^z &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} \left(\cos(\beta_k) \cos(\beta_{k'})\gamma_k^\dagger\gamma_{k'} - \cos(\beta_k) \sin(\beta_{k'})\gamma_k^\dagger\gamma_{-k'}^\dagger \right. \\ &\quad \left. - \sin(\beta_k) \cos(\beta_{k'})\gamma_{-k}\gamma_{k'} + \sin(\beta_k) \sin(\beta_{k'})\gamma_{-k}\gamma_{-k'}^\dagger \right). \end{aligned}$$

Conforme já discutido nas seções anteriores, os únicos termos que são não-nulos serão: $\langle \sigma_j^z \rangle$ e, portanto, a componente z do vetor de Bloch para o estado reduzido de um *spin* será dada pela Eq. 5.90:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_j^z \rangle &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} \left(\cos(\beta_k) \cos(\beta_{k'}) \langle \gamma_k^\dagger\gamma_{k'} \rangle - \cos(\beta_k) \sin(\beta_{k'}) \langle \gamma_k^\dagger\gamma_{-k'}^\dagger \rangle \right. \\ &\quad \left. - \sin(\beta_k) \cos(\beta_{k'}) \langle \gamma_{-k}\gamma_{k'} \rangle + \sin(\beta_k) \sin(\beta_{k'}) \langle \gamma_{-k}\gamma_{-k'}^\dagger \rangle \right), \\ \langle \sigma_j^z \rangle &= 1 - \frac{2}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k-k')j} \sin(\beta_k) \sin(\beta_{k'}) \delta_{k,k'}, \\ \langle \sigma_j^z \rangle &= 1 - \frac{2}{N} \sum_k \sin^2(\theta_k/2). \end{aligned} \quad (5.90)$$

Finalmente, na Eq. (5.91), exibimos (em [53]) a matriz de um *qubit*, reduzida de N partes, na representação de Bloch, isto é (ρ_1^N) :

$$\rho_1^N = \frac{\mathbb{I}}{2} + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_{k \in \mathcal{K}} \sin^2 \left(\frac{\theta_k}{2} \right) \right) \sigma^z, \quad (5.91)$$

onde o ângulo θ_k é o ângulo de rotação de Bogoliubov e o índice da soma é $k \in \mathcal{K}$, com $\mathcal{K} = [\pm \frac{\pi}{N}, \pm \frac{3\pi}{N}, \dots, \pm (\pi - \frac{2\pi}{N})]$. Este resultado é independente do índice do sítio, como esperado para sistemas que são invariantes translacionais [53].

5.5 Derivada segunda da QSCM para o modelo de Ising quântico $1D$

Podemos agora calcular analiticamente a QSCM (e sua derivada segunda) da matriz de densidade reduzida de um *qubit*, para o modelo de Ising quântico- $1D$, no limite termodinâmico. Da Eq. (5.1), simplesmente identificamos o vetor de Bloch da matriz densidade reduzida como um vetor de apenas uma componente não-nula: a componente z , conforme escrito na Eq. (5.90). Essa quantidade no limite termodinâmico pode ser obtida ao tomarmos o limite das somas de Riemann, $\langle \sigma^z \rangle (g) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N \langle \sigma_k^z \rangle$. A componente deste vetor de Bloch é uma função do campo g , ou seja, $\langle \sigma^z \rangle (g) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^N 1 - \frac{2}{N} \sum_k \sin^2(\theta(k))$, com $\theta(k) = \arctan \left(\frac{\sin(l)}{g - \cos(l)} \right)$, e $l = \frac{(2k-1)\pi}{N} - \pi$. Assim, a componente z do vetor de Bloch dada na Eq. (5.90) converge para a seguinte integral, mostrada na Eq. 5.92, no limite termodinâmico [53].

$$\langle \sigma^z \rangle (g) = 1 - \frac{2}{\pi} \int_{-\pi}^0 \sin^2 \left(\frac{1}{2} \arctan \left(\frac{\sin(\xi)}{g - \cos(\xi)} \right) \right) d\xi. \quad (5.92)$$

Esta integral pode ser resolvida analiticamente no limite termodinâmico para alguns valores do parâmetro do campo magnético transversal. Por exemplo, para $g = 0$, podemos facilmente obter $\langle \sigma_z \rangle = 0$, que corresponde a um estado reduzido de um *qubit* maximamente misto $\rho_1 = \mathbb{I}/2$. Em $g = 1$, *i.e.*, no ponto crítico, a integral dada na Eq. (5.92) também pode ser resolvida e obtemos $\langle \sigma_z \rangle = 2/\pi$, no limite termodinâmico. Os autovalores do estado reduzido de um *qubit* ρ_1 , em $g = 1$ podem ser obtidos analiticamente como: $\{1/2 \pm 1/\pi\}$. Para outros valores de g , no intervalo $0 \leq g \leq 1$, a integral escrita na Eq. (5.92) pode ser escrita por meio de integrais elípticas de primeiro e segundo tipos [129]. Substituindo-se o resultado obtido na Eq. (5.92) na definição de um estado escrito na base de Bloch, podemos determinar ρ_1 , isto é, a matriz densidade reduzida de um *qubit*, no limite termodinâmico:

$$\rho_1 = \frac{\mathbb{I}}{2} + \frac{\langle \sigma_z \rangle (g)}{2} \sigma_z, \quad (5.93)$$

com o resultado obtido na Eq. 5.93, podemos calcular a derivada segunda da medida de complexidade estatística quântica (Eq. (5.3)), para matriz de densidade reduzida de um

qubit, no limite termodinâmico em função do parâmetro de campo transversal g , por meio de uma expressão “fechada”.

Na Fig. 7, apresentamos (na Ref. [53]), a segunda derivada da medida QSCM em relação ao parâmetro de campo transversal g , para diferentes tamanhos de sistemas finitos $N = 4, 8, 16, 1000$. Também calculamos essa derivada no limite termodinâmico (*i.e.*, para $N \rightarrow \infty$), por meio da Eq. (5.3) e da Eq. (5.92). É bem conhecido que, em $g = 1$, há uma transição de fase quântica de segunda ordem [130]. Ao observarmos a Fig. 7, podemos reconhecer diretamente um comportamento abrupto na derivada segunda da medida neste ponto, isto é, no ponto de transição de fase [53].

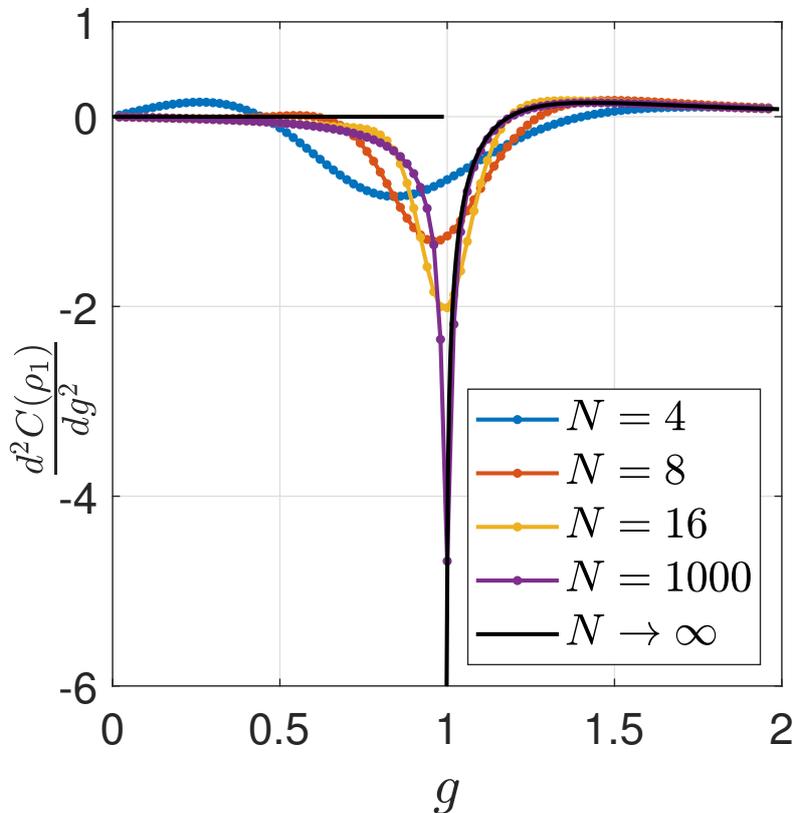


Figura 7 – Derivada segunda da QSCM com respeito ao parâmetro de campo transversal g , para diferentes sistemas finitos: $N = 4, 6, 16, 1000$ e, também, para o limite termodinâmico (linha contínua $N \rightarrow \infty$), para $g \in [0, 2]$, ver [53].

5.6 QSCM para o modelo de Heisenberg XXZ de $spin\text{-}1/2$

Modelos quânticos de *spin*, tais como o modelo de Heisenberg XXZ-1/2, podem ser simulados experimentalmente por meio de *ensembles* de átomos de Rydberg excitados em arranjos de microarmadilhas magnéticas [131] e, também, por microscopia de tunelamento de varredura de baixa temperatura [132], entre muitos outros arranjos experimentais de

simulação quântica. Vamos considerar um modelo de Heisenberg XXZ de $spin-1/2$, definido pelo seguinte hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{j=1}^N \left[S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z \right] - 2h \sum_{j=1}^N S_j^z, \quad (5.94)$$

com condições de contorno periódicas, $S_{j+N}^\alpha = S_j^\alpha$, e $S_j^\alpha = \frac{1}{2}\sigma_j^\alpha$, em que σ_j^α são matrizes de Pauli, e o parâmetro Δ é definido como parâmetro uniaxial, que consiste em uma razão entre as interações de S^z com as interações planares (S^x e S^y). Esse modelo pode interpolar continuamente entre os modelos Ising clássico, quântico XXX e quântico XY. Em $\Delta = 0$, o modelo torna-se equivalente ao modelo quântico XY ou XX0 que corresponde a um modelo de férmions livres em uma rede. Para $\Delta = 1$, ($\Delta = -1$), o hamiltoniano do modelo XXZ anisotrópico se reduz ao hamiltoniano do modelo XXX isotrópico (ferro)antiferromagnético. Para $\Delta \rightarrow \pm\infty$, o modelo tende para um modelo de Ising (ferro)anti-ferromagnético [126, 133].

O parâmetro J apenas define uma escala de energia e, desse modo, somente o seu sinal tem significado físico importante: observamos uma ordenação ferromagnética ao longo do plano $x - y$ para valores positivos de J e, para valores negativos, notamos o alinhamento antiferromagnético. A escala do parâmetro uniaxial Δ distingue um regime planar $x - y$ (quando $|\Delta| < 1$) do alinhamento axial (para $|\Delta| > 1$), veja Ref. [126]. Desse modo, é útil definir dois regimes: para $|\Delta| > 1$, o regime é um regime *do tipo-Ising* e, para $|\Delta| < 1$, o regime é *do tipo-XY*. Esses regimes são especialmente úteis se quisermos modelar materiais que possuem, respectivamente, uma grande anisotropia magnética axial e uma grande anisotropia magnética planar [134].

Aqui, estamos interessados em correlações quânticas entre os *spins* dos primeiros e segundos vizinhos mais próximos na cadeia XXZ de $spin-1/2$ com $J = 1$, a uma temperatura de $0K$ e campo externo nulo ($h = 0$). Os elementos de matriz da matriz reduzida ϱ_{i+r} são escritos em função dos valores esperados que significam funções de correlação para o primeiro vizinho mais próximo $r = 1$, isto é, para ϱ_{i+1} , funções de correlação para os segundos vizinhos mais próximos $r = 2$ (isto é, para ϱ_{i+2}) e são dadas por um conjunto de equações integrais que podem ser encontradas no Apêndice B, e em [111, 116, 135–138]. Essas duas funções de correlação para o modelo XXZ de $spin-1/2$ na temperatura de zero Kelvin, com campo nulo e no limite termodinâmico podem ser derivadas por meio da técnica do ansatz de Bethe.

Os autores na Ref. [111] investigaram a transição de fase quântica para a cadeia XXZ de $spin-1/2$ a uma temperatura de $0K$ e, também, para campo externo zero ($h = 0$), via correlações quânticas entre os primeiros e segundos vizinhos mais próximos, por meio da negatividade, do déficit de informação, do *trace distance discord* e da incerteza quântica local. Na Eq. (5.95), devido à simetria no modelo hamiltoniano, é apresentada a matriz de densidade reduzida de dois *qubits* para os sítios i e $i + r$, para $r = 1, 2$, isto é,

para primeiros e segundos vizinhos, no limite termodinâmico, escrito na base $|1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$, $|2\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$, $|3\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle$ e $|4\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$, em que $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ são os dois autovetores da matriz de Pauli σ_z , ver [111]:

$$\varrho_{i+r} = \begin{pmatrix} \varrho_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varrho_{22} & \varrho_{23} & 0 \\ 0 & \varrho_{32} & \varrho_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varrho_{44} \end{pmatrix}, \quad (5.95)$$

onde $\varrho_{11} = \frac{1+\langle\sigma_i^z\sigma_{i+r}^z\rangle}{4}$, $\varrho_{23} = \frac{\langle\sigma_i^x\sigma_{i+r}^x\rangle}{2}$, e $\varrho_{22} = \frac{1-\langle\sigma_i^z\sigma_{i+r}^z\rangle}{4}$, com $\varrho_{11} = \varrho_{44}$, $\varrho_{23} = \varrho_{32}$ e $\varrho_{22} = \varrho_{33}$. Essa matriz foi escrita em termos das correlações entre primeiros vizinhos, para $r = 1$ (correlações entre os sítios i e $i + 1$), e entre segundos vizinhos, para $r = 2$ (funções de correlação entre os sítios i e $i + 2$). Essas funções de correlação consistem em equações integrais complicadas e estão descritas, em detalhe, no Apêndice B.

Na Fig. 8, mostramos (na Ref. [53]) a QSCM, dada por $\mathcal{C}(\varrho_{i+1})$, para os primeiros vizinhos em contraste com a entropia de von Neumann $S(\varrho_{i+1})$ e a distância do traço $D(\varrho_{i+1}, \mathcal{I})$ entre ϱ e o estado maximamente misto (matriz de identidade normalizada), ambos em função da força do parâmetro uniaxial Δ . O modelo de Heisenberg XXZ de *spin*-1/2 possui dois pontos críticos: a transição de primeira ordem ocorre em $\Delta = -1$, e, também, uma transição de fase contínua aparece em $\Delta = 1$, ver [139]. Uma característica interessante da QSCM é o fato de evidenciar pontos de transições de correlação, relacionados às transições ordem e desordem, que podem não estar necessariamente ligados a pontos de transição de fase. Tomamos nota do ponto de cúspide na Fig. 8, para $\Delta \approx 2.178$. Observando-se esse ponto na curva de QSCM, pode-se dizer que esse ponto parece ser interessante e deveria merecer uma atenção especial.

Para investigar esse ponto de cúspide da medida $\mathcal{C}(\varrho_{i+1})$ para o valor $\Delta = 2.178$, vamos considerar o que acontece com o estado ϱ_{i+1} , dado pela Eq. (5.95), enquanto Δ varia. O estado ϱ_{i+1} dado na Eq. (5.95) pode ser facilmente diagonalizado, desse modo, vamos estudar a seguinte matriz $\varrho_{i+1} - \mathbb{I}/4$, que desempenha um papel importante na medida de complexidade estatística quântica como já discutido em outras seções. Esta matriz possui o seguinte conjunto de autovalores: $\{\frac{1}{4}(2\langle\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x\rangle - \langle\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\rangle), \frac{1}{4}(-2\langle\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x\rangle - \langle\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\rangle), \frac{1}{4}\langle\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\rangle, \frac{1}{4}\langle\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\rangle\}$. À medida que o valor Δ aumenta no intervalo $[1, 3]$, os valores de correlação na direção x também aumentam, enquanto as correlações em z diminuem e atingem o mínimo local observado na Fig. 8.

Nesse intervalo supracitado, o autovalor $2\langle\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x\rangle - \langle\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\rangle$ chega a zero, e isso, portanto, deve causar a transição de correlação observada. Esta transição de correlação deve-se, provavelmente, ao fato de que este autovalor se anula para alguns Δ neste intervalo e isso deveria implicar uma mudança de orientação das correlações de *spin*. Seguindo este raciocínio, para determinar tais pontos em que ocorrem mudanças de orientação das correlações de *spin*, é necessário resolver numericamente algumas equações integrais

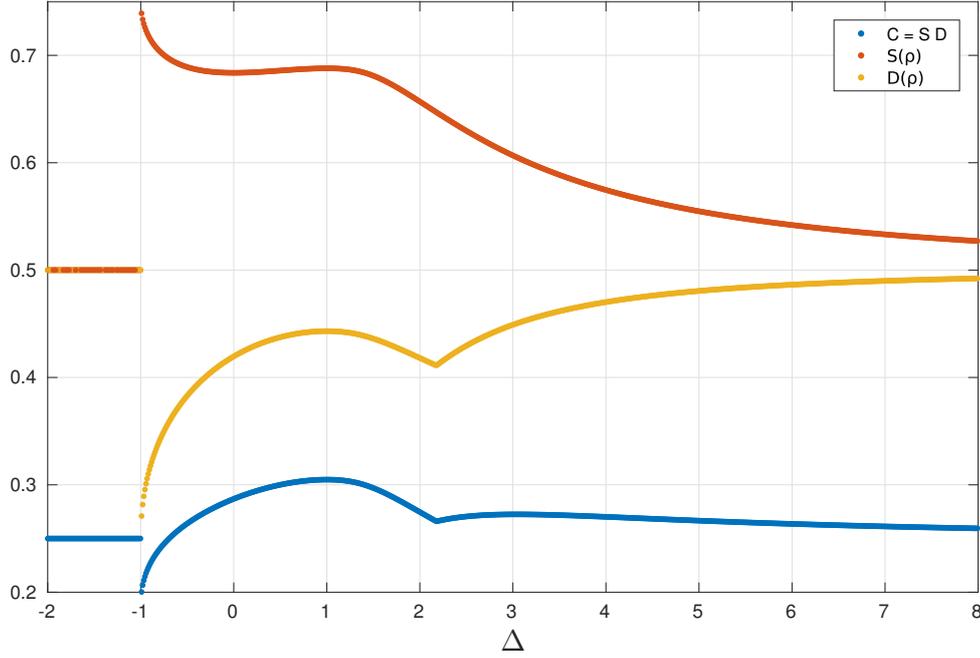


Figura 8 – Medida de complexidade estatística quântica, QSCM, $\mathcal{C}(\varrho_{i+1})$, em azul, entropia de von Neumann $S(\varrho_{i+1})$, em laranja. A função de equilíbrio é dada pela distância do traço $D(\varrho_{i+1}, \mathcal{I})$, (representada em amarelo). Todas as medidas foram calculadas para a matriz reduzida de dois *qubits* para os sítios i e $i + 1$, ϱ_{i+1} , em função de Δ , para $\Delta \in [-1, 8]$, todas as três curvas foram plotadas no limite termodinâmico [53].

complicadas, dadas pelos autovalores da Eq. (5.95), que são funções dos valores esperados mostrados nas Refs. [111, 116, 135–137], além de também serem exibidos no Apêndice B.

Este procedimento tem como objetivo determinar a solução para quais valores de Δ valem a seguinte equação integral $2\langle\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x\rangle - \langle\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\rangle = 0$. Devido ao fato de os valores de $\langle\sigma_i^y\sigma_{i+1}^y\rangle$ serem iguais aos valores de $\langle\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x\rangle$, para este hamiltoniano, a solução dessa equação indica o ponto onde a correlação xy planar diminui enquanto as correlações z aumentam, embora já estejamos na fase ferromagnética. Para $\Delta \rightarrow \infty$, o sistema se move para uma configuração que exhibe correlações apenas na direção z . Se procedermos da mesma forma, ao resolvermos a outra equação integral no conjunto de autovalores $-2\langle\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x\rangle - \langle\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\rangle = 0$, obtemos uma solução de divergência para $\Delta = -1$, (*cf.* [53]).

Na Fig. 9, mostramos (na Ref. [53]) as curvas de nível que representam os valores de $\mathcal{C}(\varrho_{i+1})$ em função das correlações: $\langle\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x\rangle$ e $\langle\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\rangle$. A região triangular representa o *convex hull* das matrizes de densidade positivas-semidefinidas. Os vértices dessa região triangular mostrados na Fig. 9 são dados por $(\langle\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x\rangle, \langle\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\rangle) = \{(-1, -1); (0, 1); (1, -1)\}$. Juntamente com o mapa de contorno da QSCM em função das funções de correlação nas direções x e z , as duas retas inclinadas simbolizam as equações integrais obtidas pela diagonalização do estado fundamental do modelo. Os pontos onde os dois autovalores de $\varrho_{i+1} - \mathbb{I}/4$ vão a zero também estão representados na Fig. 9, (*cf.* [53]).

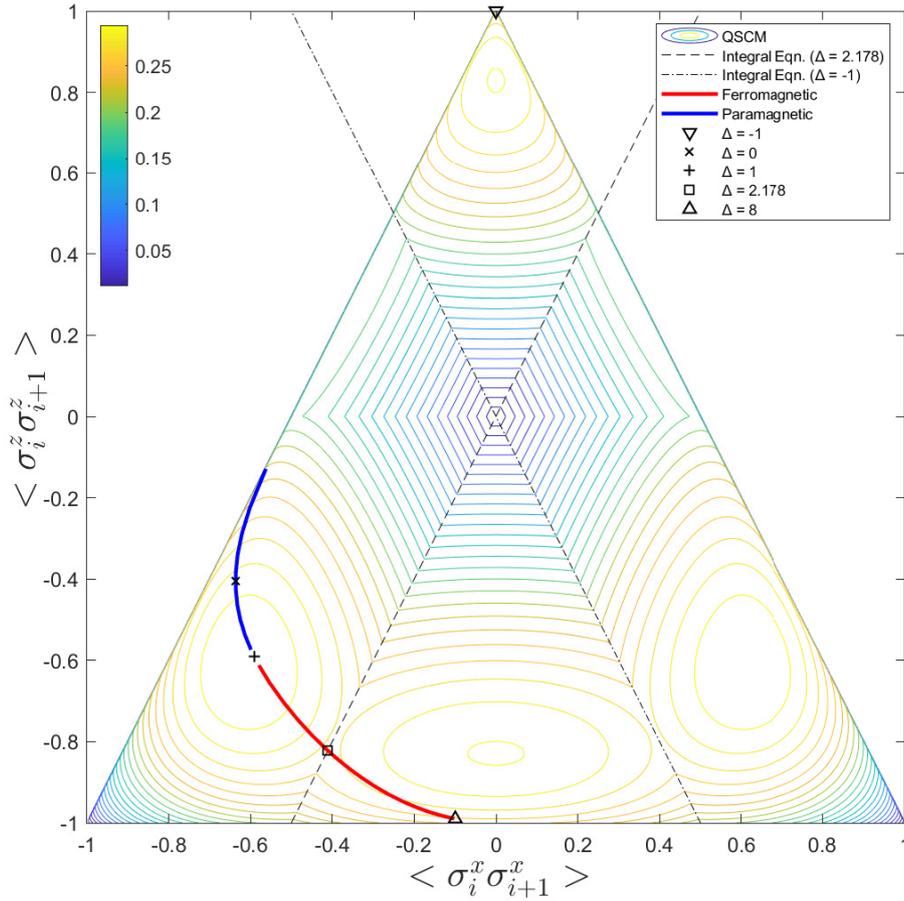


Figura 9 – Mapa de contorno das curvas de nível de $\mathcal{C}(\rho_{i+1})$, QSCM, em função das funções de correlação $\langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rangle$ e $\langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle$. A linha tracejada e inclinada representa a equação integral cuja solução é $\Delta = 2.178$. A curva traço-ponto demonstra a curva para $\Delta = -1$, onde existe um ponto de divergência. O caminho indicado dentro das curvas de nível mostra a variação da quantidade $\mathcal{C}(\rho_{i+1})$, dentro do espaço de matrizes positivas-semidefinidas, para $\Delta \in [-1, 8]$. Os pontos em destaque são: $\Delta = -1$, (∇); $\Delta = 0$, (\times); $\Delta = 1$, ($+$); $\Delta = 2.178$, (\square) e $\Delta = 8$, (\triangle). A região ferromagnética (em vermelho) e a região paramagnética (em azul) também estão representadas neste caminho [53].

Na Fig. 9, a curva grossa e colorida dentro do mapa de contorno mostra o caminho percorrido pela medida $\mathcal{C}(\rho_{i+1})$, enquanto os valores das correlações em x e z variam conforme Δ aumenta monotonicamente no intervalo: $\Delta \in [-1, 8]$. Este mesmo caminho também foi apresentado na Fig. 8, na curva azul. A parte azul da curva grossa representa os valores para as correlações em que temos um estado paramagnético e a parte vermelha da curva grossa colorida indica os valores para o arranjo ferromagnético. Também destacamos alguns pontos interessantes nesta curva colorida: para $\Delta = -1$, (∇); para $\Delta = 0$, (\times); para $\Delta = 1$, ($+$); para $\Delta = 2.178$, (\square), e, para $\Delta = 8$, (\triangle), (cf. [53]).

Conforme dito, essas equações integrais são representadas por duas linhas retas inclinadas (tracejada e traço-ponto). A linha inclinada tracejada descreve a equação

integral cuja solução é $\Delta = 2.178$. A linha inclinada traço-ponto representa a curva para a solução $\Delta = -1$, para a qual existe um ponto de divergência (ponto de transição de fase quântica). Conforme mencionado anteriormente, a QSCM mostrou-se sensível à transição de correlação que ocorre no modelo de Heisenberg XXZ de $spin-1/2$, além de detectar os pontos de transição de fase quântica para este modelo.

A Fig. 10 expressa a QSCM para a correlação entre primeiros vizinhos, dado por $\mathcal{C}(\varrho_{i+1})$, (curva em azul), e para os vizinhos mais próximos, (segundos vizinhos), escrita como $\mathcal{C}(\varrho_{i+2})$, (curva em laranja), ambos no limite termodinâmico e em função do parâmetro de campo uniaxial Δ , (*cf.* [53]). O limite assintótico para ambas as medidas

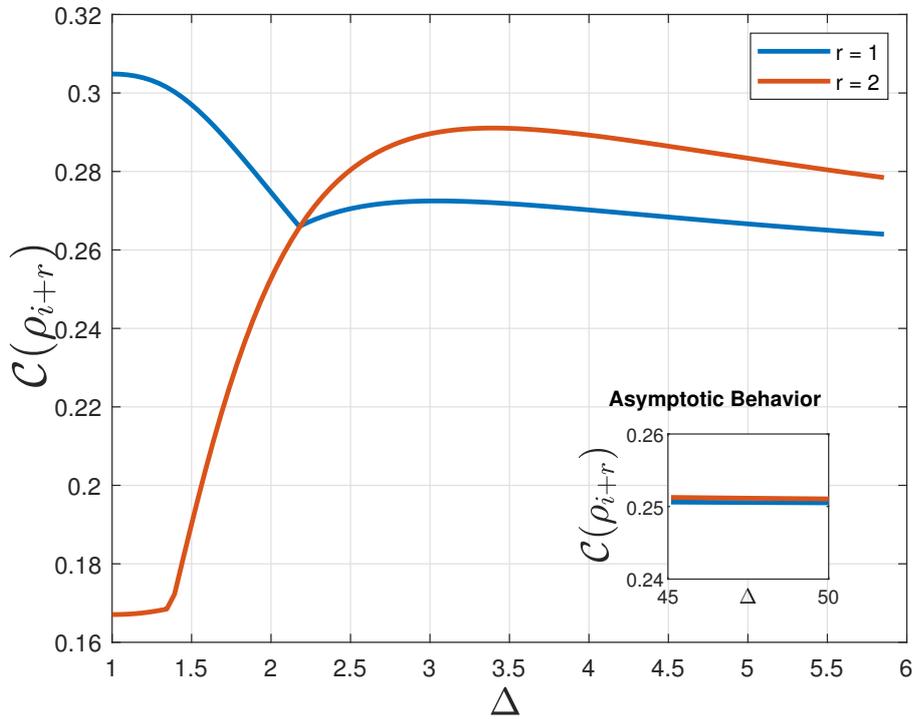


Figura 10 – Medida de complexidade estatística quântica, QSCM, $\mathcal{C}(\varrho_{i+r})$ para a matriz densidade de dois *qubits* para os sítios i e $i+r$, para $r=1$ (curva em azul), e para $r=2$ (curva em laranja), ambas no limite termodinâmico, em função da magnitude do parâmetro de campo uniaxial Δ . A subfigura demonstra o comportamento assintótico para grandes Δ , para ambos os casos. $\mathcal{C}(\varrho_{i+1})$ e $\mathcal{C}(\varrho_{i+2}) \rightarrow 1/4$ quando $\Delta \rightarrow \infty$, ver [53].

($r=1,2$) também é apresentado na subfigura. Com $\Delta \rightarrow \infty$, o comportamento dessas duas funções de correlação $\langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rangle \rightarrow 0$ e $\langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle \rightarrow -1$. Neste limite, a matriz densidade do sistema pode ser escrita como $\varrho_{i+r} \rightarrow \text{diag}\{0, 1/2, 1/2, 0\}$, para ambos os valores assintóticos dessas correlações e, assim, $S(\varrho_{i+r}) \rightarrow 1/2$. Além disso, $D(\varrho_{i+r}, \mathcal{I}) \rightarrow 1/2$, o que faz com que ambas as medidas $\mathcal{C}(\varrho_{i+r}) \rightarrow 1/4$, tanto para $r=1$, quanto para $r=2$, ver [53].

É interessante notar que $\mathcal{C}(\varrho_{i+1}) = \mathcal{C}(\varrho_{i+2})$ exatamente em $\Delta = 2.178$. A QSCM para primeiros vizinhos é maior que a QSCM entre segundos vizinhos, *i.e.*; $\mathcal{C}(\varrho_{i+1}) > \mathcal{C}(\varrho_{i+2})$, para $-1 \leq \Delta < 2.178$. Para $\Delta > 2.178$, $\mathcal{C}(\varrho_{i+1}) < \mathcal{C}(\varrho_{i+2})$, e ambas medidas

convergem para $1/4$, para grandes valores de Δ , isto é, para $\Delta \rightarrow \infty$, ainda que a medida para $r = 1$ seja majorada pela medida para $r = 2$, ou melhor, $\mathcal{C}(\varrho_{i+1}) < \mathcal{C}(\varrho_{i+2})$ em toda a região $\Delta > 2.178$.

Esse comportamento interessante pode ser uma indicação de um provável aumento de complexidade à medida que ocorre a transição ordem e desordem. Considerando-se mais correlações possíveis e ao contarmos com a ação de segundos vizinhos, é compreensível que um aumento de complexidade estatística deva ocorrer após o valor $\Delta = 2.178$, (*cf.* [53]).

6 Conclusões

Introduzimos uma versão quântica para a medida de complexidade estatística clássica (CSCM), definida primeiramente por López-Ruiz, Mancini e Calbet (LMC): a medida de complexidade estatística quântica (QSCM) e exibimos algumas de suas principais propriedades. Concluimos que a medida de complexidade estatística quântica pode desempenhar um papel de função sinalizadora de transições de correlações, além de também discernir transições de fase quânticas, devido ao fato do caráter de mudança abrupta que várias quantidades físicas experimentam nesses pontos de transição, além da maneira pela qual os estados reduzidos desses sistemas críticos transitam nessa escala de ordem e desordem. Nossa medida quântica mostrou-se ser útil e dispor de relevância física, pois apresentou possuir várias das propriedades importantes e esperadas para uma medida de complexidade estatística de *bona fide* e, com isso, ela demonstrou que poderá tornar-se útil em outras áreas da mecânica estatística e da teoria da informação quântica.

Realizamos um breve estudo sobre a evolução temporal discreta da CSCM, por meio da aplicação de matrizes estocásticas e biestocásticas em dimensão 2. Separamos a dinâmica em uma parte em regime transiente e uma outra em regime permanente e estudamos o comportamento da medida clássica para alguns exemplos. Observamos que quando a dinâmica atinge um máximo global da grandeza CSCM, esse máximo ocorre durante o regime transiente da dinâmica e essa característica captura a variação da pureza e da direção dos m -ésimos vetores da dinâmica, antes da convergência em módulo e direção para o vetor distribuição de probabilidades estacionário.

Apresentamos, nesta tese, duas aplicações da QSCM e investigamos a física de dois modelos hamiltonianos quânticos analiticamente solúveis, a saber, o modelo de Ising quântico-1D e o modelo de Heisenberg XXZ de *spin*-1/2, ambos no limite termodinâmico. Primeiramente, calculamos analiticamente a quantidade QSCM para um *qubit*, na base de Bloch, e determinamos essa medida em função da magnitude r desse vetor. Posteriormente, utilizamos este resultado para calcularmos analiticamente a medida para a matriz de densidade de um *qubit* reduzida de N *spins*. Logo, estudamos a transição de fase quântica para o modelo de Ising quântico-1D no limite $N \rightarrow \infty$, isto é, determinamos a grandeza QSCM para este modelo, no limite termodinâmico.

Realizamos uma diagonalização do modelo de Ising quântico-1D, com o intuito de estudarmos analiticamente a transição de fase quântica para este modelo. Utilizando-se do estado de um *qubit* reduzido de N partículas (escrito na base de Bloch) no limite termodinâmico e, por meio da QSCM e das suas derivadas, escritas em função do módulo r do vetor de Bloch, obtivemos analiticamente uma expressão que pôde determinar o ponto

de transição de fase quântica de segunda ordem para o modelo de Ising quântico-1D, que ocorre quando o valor do campo magnético transversal atinge o ponto $g = 1$. Dessa forma, constatamos que a QSCM pode ser utilizada como função sinalizadora da transição de fase quântica para este modelo.

Com este último resultado em mãos, realizamos um estudo da QSCM para a cadeia de Heisenberg XXZ de $spin-1/2$ e, utilizando-se do estado reduzido de dois $spins$, escrito por meio das correlações entre primeiros e segundos vizinhos, no limite termodinâmico, evidenciamos um ponto em que ocorre uma transição de correlações para este modelo. Fisicamente, em $\Delta = 2.178$, a correlação planar xy diminui enquanto as correlações na direção em z aumentam e atingem, posteriormente, um ponto de mínimo local, embora já estejamos na organização ferromagnética. Essa competição entre esses dois alinhamentos diferentes de correlações ilustra a detecção de uma transição de “ordem e desordem” à qual a medida se mostrou sensível.

Estudamos numericamente as derivadas da QSCM para esse modelo e elas também demonstraram ser sensíveis aos pontos de transição quântica. Como resumo desta análise, para o modelo de Heisenberg XXZ de $spin-1/2$, podemos listar: (i) a medida de complexidade estatística quântica (QSCM) caracteriza a transição de fase quântica de primeira ordem em $\Delta = -1$, (ii) a medida também evidencia a transição de fase quântica contínua para $\Delta = 1$, e (iii) a medida testemunha uma transição de correlação, isto é, uma transição de “ordem e desordem” que ocorre em $\Delta = 2.178$, relacionada à competição entre o alinhamento das correlações de $spins$. Também observamos que esse ponto $\Delta = 2.178$ indica o ponto na complexidade estatística quântica cujos valores (para $r = 2$) ultrapassam os valores obtidos pela complexidade estatística para $r = 1$. Esse comportamento interessante pode ser uma indicação de um provável aumento de complexidade à medida que ocorre a transição ordem e desordem. Considerando-se mais correlações possíveis e ao contarmos com a ação de segundos vizinhos, é compreensível que um aumento de complexidade estatística deva ocorrer após o valor $\Delta = 2.178$.

Diante de todo o exposto, esta tese nos possibilita a sugestão dos seguintes trabalhos de pesquisa futuros:

- Estudar a medida de complexidade estatística quântica (QSCM) para outros modelos hamiltonianos, com o intuito de buscar novas transições de correlação.
- Recentemente, conseguimos mostrar que a medida de complexidade estatística quântica (QSCM) detecta o ponto de transição de fase de primeira ordem para o modelo Lipkin-Meshkov-Glick (LMG). Explorar mais profundamente esse resultado.
- Explorar a medida de complexidade estatística clássica - CSCM para evoluções estocásticas/biestocásticas discretas em dimensões maiores, isto é, para $N > 2$.

-
- Recentemente identificamos numericamente que a QSCM é capaz de detectar o maior expoente de Lyapunov de uma dinâmica que exhibe caos quântico para um *qubit*, escrito na base de Bloch. Tentar demonstrar esse fato matematicamente.
 - Determinar se existem transições de correlações entre estados com topologia de emaranhamento diferentes, tais como as exemplificadas nos estados exemplo estudados na Sec. 4.2.

Referências

- [1] Badii, R. e A. Politi: *Complexity: Hierarchical Structures and Scaling in Physics*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1997, ISBN 9780511524691. <https://doi.org/10.1017/CB09780511524691>. Citado 4 vezes nas páginas 17, 20, 23 e 24.
- [2] Lempel, A. e J. Ziv: *On the Complexity of Finite Sequences*. IEEE Transactions on Information Theory, 22(1):75–81, 1976. <https://doi.org/10.1109/TIT.1976.1055501>. Citado na página 17.
- [3] Jiménez-Montaño, Miguel A., Werner Ebeling, Thomas Pohl e Paul E. Rapp: *Entropy and complexity of finite sequences as fluctuating quantities*. Biosystems, 64(1):23 – 32, 2002. [https://doi.org/10.1016/S0303-2647\(01\)00171-X](https://doi.org/10.1016/S0303-2647(01)00171-X). Citado na página 17.
- [4] Szczepanski, J.: *On the distribution function of the complexity of finite sequences*. Information Sciences, 179(9):1217–1220, 2009. <https://doi.org/10.1016/j.ins.2008.12.019>. Citado na página 17.
- [5] Cover, Thomas M., Peter Gacs e Robert M. Gray: *Kolmogorov’s Contributions to Information Theory and Algorithmic Complexity*. The Annals of Probability, 17(3):840–865, 1989, ISSN 00911798. <http://www.jstor.org/stable/2244387>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 21.
- [6] Chaitin, G. J.: *On The Length of Programs For Computing Finite Binary Sequences-Statistical Considerations*. Information, Randomness and Incompleteness, páginas 239–255, 1987. https://doi.org/10.1142/9789814434058_0020. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 21.
- [7] Martin, M.T, A Plastino e O.A Rosso: *Statistical complexity and disequilibrium*. Physics Letters A, 311(2):126–132, 2003. [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(03\)00491-2](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(03)00491-2). Citado 5 vezes nas páginas 17, 36, 52, 53 e 56.
- [8] Lamberti, P.W., M.T. Martin, A. Plastino e O. A. Rosso: *Intensive entropic non-triviality measure*. Phy. A, 334(1):119 – 131, 2004. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2003.11.005>. Citado na página 17.
- [9] Binder, P. M.: *Complexity and Fisher information*. Phys. Rev. E, 61:R3303–R3305, 2000. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.61.R3303>. Citado na página 17.

- [10] Shiner, J. S., Matt Davison e P. T. Landsberg: *Simple measure for complexity*. Phys. Rev. E, 59:1459–1464, 1999. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.59.1459>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 52.
- [11] Toranzo, I. V. e J. S. Dehesa: *Entropy and complexity properties of the d-dimensional blackbody radiation*. Eur. Phys. J. D, 68, 2014. <https://doi.org/10.1140/epjd/e2014-50488-4>. Citado na página 17.
- [12] Wackerbauer, R., A. Witt, H. Atmanspacher, J. Kurths e H. Scheingraber: *A comparative classification of complexity measures*. Chaos, Solitons and Fractals, 4(1):133–173, 1994. [https://doi.org/10.1016/0960-0779\(94\)90023-X](https://doi.org/10.1016/0960-0779(94)90023-X). Citado 2 vezes nas páginas 17 e 22.
- [13] Zurek, Wojciech Hubert (ed.): *Complexity, entropy, and the physics of information*. CRC Press, Boca Ratón, USA., 1990, ISBN 9780429502880. <https://doi.org/10.1201/9780429502880>. Citado na página 17.
- [14] Felice, Domenico, Stefano Mancini e Nihat Ay: *Canonical Divergence for Measuring Classical and Quantum Complexity*. Entropy, 21(4), 2019. <https://www.mdpi.com/1099-4300/21/4/435>. Citado na página 17.
- [15] Felice, Domenico, Carlo Cafaro e Stefano Mancini: *Information geometric methods for complexity*. Chaos, 28(3), 2018. <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.5018926>. Citado na página 17.
- [16] Crutchfield, James P., Christopher J. Ellison e John R. Mahoney: *Time's Barbed Arrow: Irreversibility, Crypticity, and Stored Information*. Phys. Rev. Lett., 103:094101, 2009. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.094101>. Citado na página 17.
- [17] Riechers, Paul M., John R. Mahoney, Cina Aghamohammadi e James P. Crutchfield: *Minimized state complexity of quantum-encoded cryptic processes*. Phys. Rev. A, 93:052317, 2016. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.93.052317>. Citado na página 17.
- [18] Gu, Mile, Karoline Wiesner, Elisabeth Rieper e Vlatko Vedral: *Quantum mechanics can reduce the complexity of classical models*. Nature Communications, 3:762–765, 2012. <https://doi.org/10.1038/ncomms1761>. Citado na página 17.
- [19] Yang, Chengran, Felix C. Binder, Varun Narasimhachar e Mile Gu: *Matrix Product States for Quantum Stochastic Modeling*. Phys. Rev. Lett., 121:260602, 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.260602>. Citado na página 17.

- [20] Thompson, Jayne, Andrew J. P. Garner, John R. Mahoney, James P. Crutchfield, Vlatko Vedral e Mile Gu: *Causal Asymmetry in a Quantum World*. Phys. Rev. X, 8:031013, 2018. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.8.031013>. Citado na página 17.
- [21] López-Ruiz, R., H.L. Mancini e X. Calbet: *A statistical measure of complexity*. Physics Letters A, 209(5):321–326, 1995. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(95\)00867-5](https://doi.org/10.1016/0375-9601(95)00867-5). Citado 6 vezes nas páginas 18, 32, 33, 34, 35 e 36.
- [22] *s.v. “complexity”, em Merriam-Webster.com Thesaurus*. Merriam-Webster, Springfield, MA - USA, acessado em 9 de fevereiro de 2023, ISBN 978-0877792956. <https://www.merriam-webster.com/thesaurus/complexity>. Citado na página 20.
- [23] Johnson, Neil: *Simply Complexity—A Clear Guide to Complexity Theory*. Oneworld Publications, London, UK, 2007, ISBN 978-1-78074-049-2. <https://oneworld-publications.com/work/simply-complexity/>. Citado na página 20.
- [24] Newman, M. E. J.: *Resource Letter CS-1: Complex Systems*. American Journal of Physics, 79(8):800–810, 2011. <https://doi.org/10.1119/1.3590372>. Citado na página 20.
- [25] Holland, John H.: *Complexity. A Very Short Introduction*. Oxford University Press, Oxford: UK, 2014, ISBN 978-0-19-966254-8. <https://doi.org/10.1093/actrade/9780199662548.001.0001>. Citado 3 vezes nas páginas 20, 21 e 26.
- [26] Folloni, André: *Introdução à Teoria da Complexidade*. Editora Juruá, Curitiba, Paraná: Brasil, 2016, ISBN 978-85-362-5867-6. https://www.juruia.com.br/shop_item.asp?id=24712. Citado 4 vezes nas páginas 20, 21, 26 e 27.
- [27] Morin, Edgar e Robin Postel: *On Complexity*. Hampton Press, Inc., New York, NY, 2008, ISBN 978-1-57273-801-0. http://www.hamptonpress.com/Merchant2/merchant.mvc?Screen=PROD&Product_Code=978-1-57273-801-0&Category_Code=ST. Citado 3 vezes nas páginas 20, 21 e 26.
- [28] Cooper, D. C.: *Essays on Cellular Automata*. The Computer Journal, 15(1):83–83, 1972, ISSN 0010-4620. <https://doi.org/10.1093/comjnl/15.1.83>. Citado na página 21.
- [29] Solomonoff, R.J.: *A formal theory of inductive inference. Part II*. Information and Control, 7(2):224–254, 1964, ISSN 0019-9958. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019995864901317>. Citado na página 21.

- [30] Grassberger, P.: *Toward a quantitative theory of self-generated complexity*. International Journal of Theoretical Physics, 25(1):907–938, 1986. <https://doi.org/10.1007/BF00668821>. Citado na página 22.
- [31] Bennett, C. H.: *Logical Depth and Physical Complexity*. Em Herken, R. (editor): *The universal Turing machine, a half century survey*, páginas 227–257. Oxford University Press, 1988. Citado na página 22.
- [32] Lloyd, Seth e Heinz Pagels: *Complexity as thermodynamic depth*. Annals of Physics, 188(1):186–213, 1988. [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(88\)90094-2](https://doi.org/10.1016/0003-4916(88)90094-2). Citado na página 22.
- [33] Gell-Mann, Murray: *What is Complexity? Remarks on Simplicity and Complexity by the Nobel Prize-Winning Author of The Quark and the Jaguar*. Complexity, 1(1):16–19, 1995. <https://doi.org/10.1002/cplx.6130010105>. Citado na página 22.
- [34] Lukosevicius, A. P., G. G. Marchisotti e C. A. P. Soares: *Panorama da complexidade: principais correntes, definições e constructos*. Sistemas & Gestão, 11(4):455–465, 2017. <https://doi.org/10.20985/1980-5160.2016.v11n4.1157>. Citado na página 22.
- [35] Sonntag, Richard Edwin, Claus Borgnakke e Gordon J. Van Wylen: *Fundamentals of Classical Thermodynamics*. John Wiley & Sons, Inc., New York, USA, 5a edição, 1998, ISBN 9171-51-265-3. <https://archive.org/details/1999-res-fundamentals-of-thermodynamics-5th-ed-tand-a/page/n3/mode/2up>. Citado na página 23.
- [36] Kadanoff, Leo P.: *Scaling laws for ising models near T_c* . Physics Physique Fizika, 2:263–272, 1966. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.2.263>. Citado na página 24.
- [37] Wilson, Kenneth G.: *Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture*. Phys. Rev. B, 4:3174–3183, 1971. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.4.3174>. Citado na página 24.
- [38] Solé, R. V.: *Phase Transitions*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 2011, ISBN 978-0-691-15075-8. <https://press.princeton.edu/books/paperback/9780691150758/phase-transitions>. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 27.
- [39] Bonabeau, Eric, Marco Dorigo e Guy Theraulaz: *Swarm Intelligence: From Natural to Artificial Systems*. Oxford University Press, New York: USA, 1999, ISBN 9780197561485. <https://doi.org/10.1093/oso/9780195131581.001.0001>. Citado na página 27.

- [40] Bak, Per: *How Nature Works: the science of self-organized criticality*. Springer-Verlag New York Inc., New York: USA, 1996, ISBN 978-1-4757-5426-1. <https://doi.org/10.1007/978-1-4757-5426-1>. Citado na página 28.
- [41] Oliveira, Thiago R. de, Gustavo Rigolin e Marcos C. de Oliveira: *Genuine multipartite entanglement in quantum phase transitions*. Phys. Rev. A, 73:010305, 2006. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.73.010305>. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.
- [42] Osborne, Tobias J. e Michael A. Nielsen: *Entanglement in a simple quantum phase transition*. Phys. Rev. A, 66:032110, 2002. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.66.032110>. Citado 4 vezes nas páginas 28, 29, 30 e 85.
- [43] Osborne, T.J. e M.A. Nielsen: *Entanglement, Quantum Phase Transitions, and Density Matrix Renormalization*. Quantum Information Processing, 1:45–53, 2002. <https://doi.org/10.1023/A:1019601218492>. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 30.
- [44] Osterloh, A., Luigi Amico, G. Falci e Rosario Fazio: *Scaling of entanglement close to a quantum phase transition*. Nature, 416:608–610, 2002. <https://doi.org/10.1038/416608a>. Citado na página 29.
- [45] Latorre, J. I., E. Rico e G. Vidal: *Ground State Entanglement in Quantum Spin Chains*. Quantum Info. Comput., 4(1):48–92, 2004, ISSN 1533-7146. Citado na página 29.
- [46] Coffman, Valerie, Joydip Kundu e William K. Wootters: *Distributed entanglement*. Phys. Rev. A, 61:052306, 2000. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.61.052306>. Citado na página 29.
- [47] Wilson, Kenneth G.: *The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*. Rev. Mod. Phys., 47:773–840, 1975. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.47.773>. Citado na página 30.
- [48] Fisher, Michael E.: *Renormalization group theory: Its basis and formulation in statistical physics*. Rev. Mod. Phys., 70:653–681, 1998. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.70.653>. Citado na página 30.
- [49] White, Steven R.: *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. Lett., 69:2863–2866, 1992. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69.2863>. Citado na página 30.
- [50] White, Steven R.: *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. B, 48:10345–10356, 1993. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.10345>. Citado na página 30.

- [51] White, Steven R. e David A. Huse: *Numerical renormalization-group study of low-lying eigenstates of the antiferromagnetic $S=1$ Heisenberg chain*. Phys. Rev. B, 48:3844–3852, 1993. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.3844>. Citado na página 30.
- [52] White, Steven R.: *Strongly correlated electron systems and the density matrix renormalization group*. Physics Reports, 301(1):187–204, 1998, ISSN 0370-1573. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157398000106>. Citado na página 30.
- [53] Cesário, André T., Diego L. B. Ferreira, Tiago Debarba, Fernando Iemini, Thiago O. Maciel e Reinaldo O. Vianna: *Quantum Statistical Complexity Measure as a Signaling of Correlation Transitions*. Entropy, 24(8):1161, 2022. <https://www.mdpi.com/1099-4300/24/8/1161>. Citado 23 vezes nas páginas 13, 14, 32, 34, 35, 36, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 67, 84, 85, 86, 87, 89, 90, 91, 92 e 93.
- [54] Anteneodo, C. e A. R. Plastino: *Some features of the López-Ruiz-Mancini-Calbet (LMC) statistical measure of complexity*. Physics Letters A, 223(5):348–354, 1996. [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(96\)00756-6](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(96)00756-6). Citado na página 35.
- [55] Catalán, Raquel G., José Garay e Ricardo López-Ruiz: *Features of the extension of a statistical measure of complexity to continuous systems*. Phys. Rev. E, 66, 2002. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.66.011102>. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 36.
- [56] Rosso, Osvaldo A., M. T. Martin, H. A. Larrondo, A. M. Kowalski e A. Plastino: *Generalized Statistical Complexity - A New Tool for Dynamical Systems*. Bentham Science Publisher, Sharjah, E. A. U., 2013, ISBN 978-1-60805-761-0. <https://doi.org/10.2174/9781608057603113010013>. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 51.
- [57] Tsallis, C.: *Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics*. J. Stat. Phys., 52:479–487, 1988. <https://doi.org/10.1007/BF01016429>. Citado na página 35.
- [58] Gell-Mann, M. (ed). e C. (ed). Tsallis: *Nonextensive Entropy - Interdisciplinary Applications*. Oxford University Press, Oxford: UK, 2004, ISBN 9780195159769. <https://doi.org/10.1093/oso/9780195159769.001.0001>. Citado na página 35.
- [59] Rényi, A.: *On Measures of Entropy and Information*. páginas 547–561, Durham, NC: USA, 1961. University of California Press. <https://projecteuclid.org/euclid.bsm/1200512181>. Citado na página 35.
- [60] López-Ruiz, R.: *Shannon information, LMC complexity and Rényi entropies: a straightforward approach*. Biophysical Chemistry, 115(2):215–218, 2005. <https://doi.org/10.1016/j.bpc.2004.12.035>. Citado na página 35.

- [61] Kowalski, Andres M., Maria Teresa Martín, Angelo Plastino, Osvaldo A. Rosso e Montserrat Casas: *Distances in Probability Space and the Statistical Complexity Setup*. Entropy, 13(6):1055–1075, 2011. <https://www.mdpi.com/1099-4300/13/6/1055>. Citado na página 35.
- [62] Bhattacharyya, A.: *n a measure of divergence between two statistical populations defined by their probability distributions*. Bull. Calcutta Math. Soc., 35:99–109, 1943. <https://mathscinet.ams.org/mathscinet-getitem?mr=0010358>. Citado na página 35.
- [63] Majtey, A., P. W. Lamberti, M. T. Martin e A. Plastino: *Wootters' distance revisited: a new distinguishability criterium*. Eur. Phys. J. D, 32:413–419, 2005. <https://doi.org/10.1140/epjd/e2005-00005-1>. Citado na página 35.
- [64] Kullback, S. e R. A. Leibler: *On Information and Sufficiency*. Ann. Math. Statist., 22(1):79–86, 1951. <https://doi.org/10.1214/aoms/1177729694>. Citado na página 35.
- [65] Majtey, A. P., P. W. Lamberti e D. P. Prato: *Jensen-Shannon divergence as a measure of distinguishability between mixed quantum states*. Phys. Rev. A, 72:052310, Nov 2005. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.72.052310>. Citado na página 36.
- [66] López-Ruiz, R., Á. Nagy, E. Romera e J. Sañudo: *A generalized statistical complexity measure: Applications to quantum systems*. Journal of Mathematical Physics, 50(12):123528, 2009. <https://doi.org/10.1063/1.3274387>. Citado na página 36.
- [67] Sañudo, J. e R. López-Ruiz: *Statistical complexity and Fisher-Shannon information in the H-atom*. Physics Letters A, 372(32):5283 – 5286, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2008.06.012>. Citado na página 36.
- [68] Montgomery Jr., H.E. e K.D. Sen: *Statistical complexity and Fisher-Shannon information measure of H_2^+* . Physics Letters A, 372(13):2271 – 2273, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2007.11.041>. Citado na página 36.
- [69] Sen, K. D.: *Statistical Complexity-Applications in Electronic Structure*. Springer Dordrecht, Dordrecht, Países Baixos, 2011, ISBN 978-90-481-3890-6. <https://doi.org/10.1007/978-90-481-3890-6>. Citado na página 36.
- [70] Sañudo, J. e R. López-Ruiz: *Alternative evaluation of statistical indicators in atoms: The non-relativistic and relativistic cases*. Physics Letters A, 373(30):2549 – 2551, 2009. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2009.05.030>. Citado na página 36.

- [71] Moustakidis, Ch. C., K. Ch. Chatzisavvas, N. S. Nikolaidis e C. P. Panos: *Statistical measure of complexity of hard-sphere gas: applications to nuclear matter*. arXiv:1002.2515 [quant-ph], 2010. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1002.2515>. Citado na página 36.
- [72] Sánchez-Moreno, P., J. C. Angulo e J. S. Dehesa: *A generalized complexity measure based on Rényi entropy*. J. Eur. Phys. J. D, 68, 2014. <https://doi.org/10.1140/epjd/e2014-50127-2>. Citado na página 36.
- [73] Lopez-Ruiz, R., J. Sanudo, E. Romera e X. Calbet: *Statistical Complexity and Fisher-Shannon Information. Applications*. arXiv:1201.2291 [nlin.CD], 2012. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1201.2291>. Citado na página 36.
- [74] López-Ruiz, R.: *Complexity In Some Physical Systems*. International Journal of Bifurcation and Chaos, 11(10):2669–2673, 2001. <https://doi.org/10.1142/S0218127401003711>. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 39.
- [75] Cover, Thomas M. e Joy A. Thomas: *Elements of Information Theory*. Wiley–Interscience publication, New Jersey, USA, 2a edição, 2006, ISBN 9780471241959. <https://doi.org/10.1002/047174882X>. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 40.
- [76] Nielsen, Michael A. e Isaac L. Chuang: *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. Cambridge University Press, Cambridge, 10a edição, 2010, ISBN 9781107002173. <https://doi.org/10.1017/CB09780511976667>. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 40.
- [77] Cesário, André T.: *Essay on the foundations of classical and quantum information theories*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais-UFMG. <http://hdl.handle.net/1843/JCBV-8PAKFS>. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 40.
- [78] Tijms, Henk C.: *A First Course in Stochastic Models*. John Wiley & Sons Ltd, West Sussex, England, 2003, ISBN 9780471498803. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/047001363X>. Citado na página 40.
- [79] Behrends, Ehrhard: *Introduction to Markov Chains With Special Emphasis on Rapid Mixing*. Advanced Lectures in Mathematics. Springer Fachmedien Wiesbaden, Vieweg Teubner Verlag Wiesbaden, 2000, ISBN 978-3-322-90157-6. <https://doi.org/10.1007/978-3-322-90157-6>. Citado 3 vezes nas páginas 40, 42 e 43.
- [80] Norris, J.: *Markov chains*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1997. <https://doi.org/10.1017/CB09780511810633>. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 42.

- [81] Privault, Nicolas: *Understanding Markov Chains*. Springer Singapore, Singapore, 2a edição, 2018, ISBN 978-981-13-0659-4. <https://doi.org/10.1007/978-981-13-0659-4>. Citado 3 vezes nas páginas 40, 44 e 48.
- [82] Gallager, Robert G.: *Stochastic processes: theory for applications*. Cambridge University Press, United Kingdom, 2013, ISBN 978-1-107-03975-9. <http://www.cambridge.org/9781107039759>. Citado na página 40.
- [83] Suhov, Y. e M. Kelbert: *Probability and Statistics by Example Volume 2. Markov Chains: A Primer in Random Processes and their Applications*. Cambridge University Press, New York, USA, 2008, ISBN 9780521847674. <http://www.cambridge.org/9780521847674>. Citado na página 40.
- [84] Meyn, S. e R. L. Tweedie: *Markov Chains and Stochastic Stability*. Cambridge University Press, New York, USA, 2009, ISBN 978-0-521-73182-9. <http://www.cambridge.org/9780521731829>. Citado na página 40.
- [85] Lawler, Gregory F.: *Introduction to Stochastic Processes*. Chapman and Hall-CRC, New York, USA, 2nd edição, 2006, ISBN 9781315273600. <https://doi.org/10.1201/9781315273600>. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 48.
- [86] Pinsky, Mark A. e Samuel Karlin: *An Introduction to Stochastic Modeling*. Elsevier Inc., Burlington, USA, 4a edição, 2011, ISBN 978-0-12-381416-6. <https://doi.org/10.1016/C2009-1-61171-0>. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 48.
- [87] Rosenthal, Jeffrey: *Convergence Rates for Markov Chains*. JSTOR-SIAM Review, 37(3):387–405, 1995. <http://www.jstor.org/stable/2132659>. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 49.
- [88] Jerison, Daniel: *General mixing time bounds for finite Markov chains via the absolute spectral gap*. arXiv:1310.8021 [math.PR], 2013. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1310.8021>. Citado na página 45.
- [89] Aldous, David J.: *Some Inequalities for Reversible Markov Chains*. Journal of the London Mathematical Society, s2-25(3):564–576, 1982. <https://doi.org/10.1112/jlms/s2-25.3.564>. Citado na página 45.
- [90] Levin, David A., Yuval Peres e Elizabeth L. Wilmer: *Markov Chains and Mixing Times*. American Mathematical Society, 201 Charles Street Providence, Rhode Island, USA, 2009, ISBN 978-0-8218-4739-8. <https://bookstore.ams.org/mbk-58>. Citado na página 45.
- [91] Diaconis, Persi e Daniel Stroock: *Geometric Bounds for Eigenvalues of Markov Chains*. The Annals of Applied Probability, 1(1):36–61, 1991. <http://www.jstor.org/stable/2959624>. Citado na página 45.

- [92] Crutchfield, James P., David P. Feldman e Cosma Rohilla Shalizi: *Comment I on “Simple measure for complexity”*. Phys. Rev. E, 62:2996–2997, 2000. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.62.2996>. Citado na página 52.
- [93] Binder, P. M. e Nicolás Perry: *Comment II on “Simple measure for complexity”*. Phys. Rev. E, 62:2998–2999, 2000. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.62.2998>. Citado na página 52.
- [94] Shiner, J. S., Matt Davison e P. T. Landsberg: *Reply to Comments on “Simple measure for complexity”*. Phys. Rev. E, 62:3000–3003, 2000. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.62.3000>. Citado na página 52.
- [95] Rosso, O.A, M.T Martin e A Plastino: *Brain electrical activity analysis using wavelet-based informational tools (II): Tsallis non-extensivity and complexity measures*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 320:497–511, 2003. [https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(02\)01529-7](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(02)01529-7). Citado na página 52.
- [96] Piqueira, José Roberto C.: *A comparison of LMC and SDL complexity measures on binomial distributions*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 444:271–275, 2016. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437115008882>. Citado na página 52.
- [97] Wootters, W. K.: *Statistical distance and Hilbert space*. Phys. Rev. D, 23:357–362, 1981. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.23.357>. Citado na página 53.
- [98] Wright, F. E.: *An Eyepiece for Measuring the Percentage Plane-Polarization in a Beam of Light*. J. Opt. Soc. Am., 24(8):206–216, 1934. <http://opg.optica.org/abstract.cfm?URI=josa-24-8-206>. Citado na página 53.
- [99] Wootters, W.: *Quantum Optics, Experimental Gravity, and Measurement Theory: A Measure of the Distinguishability of Quantum States*. NATO Science Series B: (NSSB, volume 94). Springer New York, New York, NY, 1983, ISBN 978-1-4613-3712-6. <https://doi.org/10.1007/978-1-4613-3712-6>. Citado na página 55.
- [100] Müller-Lennert, M., F. Dupuis, O. Szechr, S. Fehr e M. Tomamichel: *On quantum Rényi entropies: A new generalization and some properties*. J. Math. Phys., 54(12):122203, 2013. <https://doi.org/10.1063/1.4838856>. Citado na página 58.
- [101] Petz, D. e D. Virosztek: *Some inequalities for quantum Tsallis entropy related to the strong subadditivity*. Mathematical Inequalities and Applications, 18:555–568, 2015. <http://dx.doi.org/10.7153/mia-18-41>. Citado na página 58.

- [102] Bhatia, R.: *Matrix Analysis*. Graduate Texts in Mathematics. Springer New York, New York, NY, 2013, ISBN 9781461206538. <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-0653-8>. Citado na página 58.
- [103] Misra, A., U. Singh, M. N. Bera e A. K. Rajagopal: *Quantum Rényi relative entropies affirm universality of thermodynamics*. Phys. Rev. E, 92:042161, 2015. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.042161>. Citado na página 58.
- [104] Audenaert, Koenraad M. R.: *Quantum skew divergence*. Journal of Mathematical Physics, 55(11):112202, 2014. <https://doi.org/10.1063/1.4901039>. Citado na página 58.
- [105] Schumacher, B. e M. D. Westmoreland: *Relative entropy in quantum information theory*. arXiv:quant-ph/0004045, 2000. <https://doi.org/10.48550/arXiv.quant-ph/0004045>. Citado na página 58.
- [106] Sugiura, Sho e Akira Shimizu: *Canonical Thermal Pure Quantum State*. Phys. Rev. Lett., 111:010401, 2013. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.010401>. Citado na página 58.
- [107] Bengtsson, I. e K. Życzkowski: *Geometry of Quantum States: An Introduction to Quantum Entanglement*. Cambridge University Press, Cambridge: UK, 2006, ISBN 9780511535048. <https://doi.org/10.1017/CB09780511535048>. Citado na página 58.
- [108] Feldman, David P. e James P. Crutchfield: *Measures of statistical complexity: Why?* Physics Letters A, 238(4):244 – 252, 1998. [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(97\)00855-4](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(97)00855-4). Citado na página 60.
- [109] Ciccarello, F., T. Tufarelli e V. Giovannetti: *Toward computability of trace distance discord*. New Journal of Physics, 16(1):013038, 2014. <http://stacks.iop.org/1367-2630/16/i=1/a=013038>. Citado na página 62.
- [110] Debarba, Tiago, Thiago O. Maciel e Reinaldo O. Vianna: *Witnessed entanglement and the geometric measure of quantum discord*. Phys. Rev. A, 86:024302, 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.86.024302>. Citado na página 62.
- [111] Ye, Biao Liang, Bo Li, Xianqing Li-Jost e Shao Ming Fei: *Quantum correlations in critical XXZ system and LMG model*. International Journal of Quantum Information, 16(03):1850029, 2018. <https://doi.org/10.1142/S0219749918500296>. Citado 4 vezes nas páginas 62, 88, 89 e 90.
- [112] Girolami, Davide, Tommaso Tufarelli e Gerardo Adesso: *Characterizing Nonclassical Correlations via Local Quantum Uncertainty*. Phys. Rev. Lett., 110:240402,

2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.240402>. Citado na página 62.
- [113] Werlang, T., C. Trippe, G. A. P. Ribeiro e Gustavo Rigolin: *Quantum Correlations in Spin Chains at Finite Temperatures and Quantum Phase Transitions*. Phys. Rev. Lett., 105:095702, 2010. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.095702>. Citado na página 62.
- [114] Werlang, T., G. A. P. Ribeiro e Gustavo Rigolin: *Spotlighting quantum critical points via quantum correlations at finite temperatures*. Phys. Rev. A, 83:062334, 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.83.062334>. Citado na página 62.
- [115] Li, Yan Chao e Hai Qing Lin: *Thermal quantum and classical correlations and entanglement in the XY spin model with three-spin interaction*. Phys. Rev. A, 83:052323, 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.83.052323>. Citado na página 62.
- [116] Justino, L. e Thiago R. de Oliveira: *Bell inequalities and entanglement at quantum phase transitions in the XXZ model*. Phys. Rev. A, 85:052128, 2012. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.85.052128>. Citado 4 vezes nas páginas 62, 88, 90 e 117.
- [117] Malvezzi, A. L., G. Karpat, B. Çakmak, F. F. Fanchini, T. Debarba e R. O. Vianna: *Quantum correlations and coherence in spin-1 Heisenberg chains*. Phys. Rev. B, 93:184428, 2016. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.184428>. Citado na página 62.
- [118] Ferreira, Diego L. B., Thiago O. Maciel, Reinaldo O. Vianna e Fernando Iemini: *Quantum correlations, entanglement spectrum, and coherence of the two-particle reduced density matrix in the extended Hubbard model*. Phys. Rev. B, 105:115145, 2022. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.105.115145>. Citado na página 62.
- [119] Eltschka, C, A Osterloh, J Siewert e A Uhlmann: *Three-tangle for mixtures of generalized GHZ and generalized W states*. New Journal of Physics, 10(4):043014, 2008. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/10/4/043014>. Citado na página 63.
- [120] Greenberger, Daniel M., Michael A. Horne e Anton Zeilinger: *arXiv:0712.0921 [quant-ph]*. arXiv, 2007. <https://arxiv.org/abs/0712.0921v1>. Citado na página 63.

- [121] Bouwmeester, Dik, Jian Wei Pan, Matthew Daniell, Harald Weinfurter e Anton Zeilinger: *Observation of Three-Photon Greenberger-Horne-Zeilinger Entanglement*. Phys. Rev. Lett., 82:1345–1349, 1999. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.82.1345>. Citado na página 63.
- [122] Cabello, Adán: *Bell's theorem with and without inequalities for the three-qubit Greenberger-Horne-Zeilinger and W states*. Phys. Rev. A, 65:032108, 2002. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.65.032108>. Citado na página 63.
- [123] Ising, Ernst: *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*. Zeitschrift für Physik, 31(1):253–258, 1925, ISSN 0044-3328. <http://dx.doi.org/10.1007/BF02980577>. Citado na página 68.
- [124] Sachdev, Subir: *Quantum phase transitions*. Cambridge University Press, Cambridge: UK, 2011, ISBN 9780511973765. <https://doi.org/10.1017/CB09780511973765>. Citado na página 68.
- [125] Nielsen, Michael A: *The Fermionic canonical commutation relations and the Jordan-Wigner transform*. http://michaelnielsen.org/blog/archive/notes/fermions_and_jordan_wigner.pdf. Citado na página 68.
- [126] Franchini, Fabio: *Notes on Bethe Ansatz Techniques*, 2011. <https://people.sissa.it/~ffranchi/BAnotes.pdf>. Citado 2 vezes nas páginas 68 e 88.
- [127] Damski, Bogdan e Marek M Rams: *Exact results for fidelity susceptibility of the quantum Ising model: the interplay between parity, system size, and magnetic field*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 47(2):025303, 2014. <http://stacks.iop.org/1751-8121/47/i=2/a=025303>. Citado 2 vezes nas páginas 68 e 73.
- [128] Lieb, E., T. Schultz e D. Mattis: *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*. Annals of Physics, 16(3):407 – 466, 1961, ISSN 0003-4916. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491661901154>. Citado na página 70.
- [129] Pfeuty, Pierre: *The one-dimensional Ising model with a transverse field*. Annals of Physics, 57(1):79 – 90, 1970. [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(70\)90270-8](https://doi.org/10.1016/0003-4916(70)90270-8). Citado na página 86.
- [130] Damski, B. e Marek M. Rams: *Exact results for fidelity susceptibility of the quantum Ising model: the interplay between parity, system size, and magnetic field*. Journal of Physics A–Mathematical and Theoretical, 47(2):025303, 2014. <http://stacks.iop.org/1751-8121/47/i=2/a=025303>. Citado na página 87.

- [131] Whitlock, Shannon, Alexander W Glaetzle e Peter Hannaford: *Simulating quantum spin models using Rydberg-excited atomic ensembles in magnetic microtrap arrays*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 50(7):074001, 2017. <http://stacks.iop.org/0953-4075/50/i=7/a=074001>. Citado na página 87.
- [132] Toskovic, R., R. van den Berg, A. Spinelli, I. S. Eliens, B. van den Toorn, B. Bryant, J. S. Caux e A. F. Otte: *Atomic spin-chain realization of a model for quantum criticality*. Nature Physics, 12, 2016. <https://doi.org/10.1038/nphys3722>. Citado na página 87.
- [133] Slavnov, Nikita: *Algebraic Bethe Ansatz and Correlation Functions-An Advanced Course*. World Scientific, Washington, D.C., USA, 2022, ISBN 978-981-125-425-3. <https://doi.org/10.1142/12776>. Citado 2 vezes nas páginas 88 e 117.
- [134] Sariyer, Ozan S.: *Two-dimensional quantum-spin-1/2 XXZ magnet in zero magnetic field: global thermodynamics from renormalization group theory*. arXiv:1807.03250 [cond-mat.stat-mech], 2018. <https://doi.org/10.1080/14786435.2019.1605212>. Citado na página 88.
- [135] Takahashi, Minoru, Go Kato e Masahiro Shiroishi: *Next Nearest-Neighbor Correlation Functions of the Spin-1/2 XXZ Chain at Massive Region*. Journal of the Physical Society of Japan, 73(1):245–253, 2004. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.73.245>. Citado 3 vezes nas páginas 88, 90 e 117.
- [136] Kato, Go, Masahiro Shiroishi, Minoru Takahashi e Kazumitsu Sakai: *Third-neighbour and other four-point correlation functions of spin-1/2 XXZ chain*. Journal of Physics A—Mathematical and General, 37(19):5097, 2004. <http://stacks.iop.org/0305-4470/37/i=19/a=001>. Citado 3 vezes nas páginas 88, 90 e 117.
- [137] Kato, Go, Masahiro Shiroishi, Minoru Takahashi e Kazumitsu Sakai: *Next-nearest-neighbour correlation functions of the spin-1/2 XXZ chain at the critical region*. Journal of Physics A—Mathematical and General, 36(23):L337, 2003. <http://stacks.iop.org/0305-4470/36/i=23/a=102>. Citado 3 vezes nas páginas 88, 90 e 117.
- [138] Shiroishi, Masahiro e Minoru Takahashi: *Exact Calculation of Correlation Functions for Spin-1/2 Heisenberg Chain*. Journal of the Physical Society of Japan, 74(Suppl):47–52, 2005. <https://doi.org/10.1143/JPSJS.74S.47>. Citado na página 88.
- [139] Takahashi, M.: *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*. Cambridge University Press, Cambridge: Cambridge University, 1999, ISBN 13978-0-521-55143. <https://doi.org/10.1017/CB09780511524332>. Citado 2 vezes nas páginas 89 e 117.

-
- [140] Wilde, Mark M.: *Quantum Information Theory*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2a edição, 2017, ISBN 9781139525343. <https://doi.org/10.1017/CB09781139525343>. Citado na página 113.

Apêndices

APÊNDICE A – Algumas demonstrações

A.1 Subaditividade entre muitas cópias

Proposição 4. *Dado um estado produto $\rho^{\otimes n} \in \mathcal{D}(\mathcal{H}^{\otimes n})$, QSCM é uma função subaditiva:*

$$\mathcal{C}(\rho^{\otimes n}) \leq n\mathcal{C}(\rho). \quad (\text{A.1})$$

A igualdade valerá se escolhermos a função de desequilíbrio para ser a entropia relativa quântica, $S(\rho||\mathcal{I}) = \log N - S(\rho)$, que é uma função aditiva sob produto tensorial. Neste caso, a medida será aditiva: $\mathcal{C}(\rho^{\otimes n}) = n\mathcal{C}(\rho)$.

Demonstração. A entropia de von Neumann é aditiva para os estados do produto: $S(\rho^{\otimes n}) = nS(\rho)$. Isso significa que a informação contida em um sistema não correlacionado $\rho^{\otimes n}$ é igual à soma da informação das suas partes constituintes. Essa igualdade também vale para a entropia de Shannon. No entanto, a distância do traço é subaditiva em relação ao produto tensorial: $D(\rho \otimes \rho', \mathcal{I} \otimes \mathcal{I}) \leq D(\rho, \mathcal{I}) + D(\rho', \mathcal{I})$, $\forall \rho, \rho'$, ver a Ref. [140]. Provaremos esta proposição por indução e, também, consideraremos apenas estados de mesma dimensão, *i.e.*; $\dim(\rho^{\otimes n}) = \dim(\mathcal{I}^{\otimes n})$, $\forall n$. É fácil observar que a proposição é verdadeira para $n = 1$. Suponhamos agora, como um passo de indução, que para algum $n = k > 1$, $k \in \mathbb{N}$, $\mathcal{C}(\rho^{\otimes k}) \leq k\mathcal{C}(\rho)$.

$$\mathcal{C}(\rho^{\otimes k+1}) = \frac{S(\rho^{\otimes k} \otimes \rho)}{\log(N^{k+1})} D(\rho^{\otimes k} \otimes \rho, \mathcal{I}^{\otimes k+1}), \quad (\text{A.2})$$

$$\mathcal{C}(\rho^{\otimes k+1}) = (k+1) \frac{S(\rho)}{\log(N^{k+1})} D(\rho^{\otimes k} \otimes \rho, \mathcal{I}^{\otimes k+1}), \quad (\text{A.3})$$

$$\mathcal{C}(\rho^{\otimes k+1}) = \frac{S(\rho)}{\log(N)} D(\rho^{\otimes k} \otimes \rho, \mathcal{I}^{\otimes k+1}). \quad (\text{A.4})$$

Utilizando-se a propriedade de subaditividade da distância do traço $D(\rho^{\otimes k}, \mathcal{I}) \leq kD(\rho, \mathcal{I})$, e, também, utilizando-se de $S(\rho^{\otimes k}) = kS(\rho)$, para $n = k + 1$ arbitrário teremos:

$$\mathcal{C}(\rho^{\otimes k+1}) \leq (k+1) \frac{S(\rho)}{\log(N)} D(\rho, \mathcal{I}), \quad (\text{A.5})$$

$$= (k+1)\mathcal{C}(\rho). \quad (\text{A.6})$$

Portanto, $\mathcal{C}(\rho^{\otimes n}) \leq n\mathcal{C}(\rho)$, $\forall n$. □

A.2 Estado estacionário para cadeias de Markov com matrizes de transição estocásticas e biestocásticas

Lema 1. *Em dimensão $N = 2$, dados possíveis estados $E = \{0, 1\}$, e dada matriz de transição estocástica $S = \begin{pmatrix} 1-a & b \\ a & 1-b \end{pmatrix}$, com $0 < a + b < 2$, a matriz S^n , para $n \in \mathbb{N}$ é dada por:*

$$S^n = \begin{pmatrix} 1-a & b \\ a & 1-b \end{pmatrix}^n = \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b & b \\ a & a \end{pmatrix} + \frac{(1-a-b)^n}{a+b} \begin{pmatrix} a & -b \\ -a & b \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Demonstração. A prova será dada por indução. Suponhamos que a matriz S^n possa ser decomposta conforme descrita na Eq. A.7.

1. A decomposição é válida para $n = 1$,

$$S^1 = \begin{pmatrix} 1-a & b \\ a & 1-b \end{pmatrix}^1 = \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b & b \\ a & a \end{pmatrix} + \frac{(1-a-b)}{a+b} \begin{pmatrix} a & -b \\ -a & b \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

2. Como passo de indução, vamos supor que a afirmação dada pela Eq. A.7 seja verdadeira para algum $k > n$. Vamos mostrar que ela é válida para $k + 1$.

$$S^{k+1} = S^k \cdot S = \begin{pmatrix} 1-a & b \\ a & 1-b \end{pmatrix}^{k+1} = \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b & b \\ a & a \end{pmatrix} + \frac{(1-a-b)^{k+1}}{a+b} \begin{pmatrix} a & -b \\ -a & b \end{pmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

3. Finalmente, devido ao fato de $\begin{pmatrix} b & b \\ a & a \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a & -b \\ -a & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, teremos que $S^{k+1} = S^k S^1$.

□

Teorema (estado estacionário para cadeias de Markov com matrizes de transição estocásticas – Teorema 5). *Em dimensão $N = 2$, dados possíveis estados $E = \{0, 1\}$, e dada matriz de transição estocástica $S = \begin{pmatrix} 1-a & b \\ a & 1-b \end{pmatrix}$, com $0 < a + b < 2$, a distribuição de probabilidades estacionária, para $n \rightarrow \infty$, com $n \in \mathbb{N}$, é dada por: $\vec{\pi} = \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$.*

Demonstração. Utilizando-se a decomposição demonstrada no Lema 1, e seja o vetor $\vec{p} = (\alpha, 1 - \alpha)^T$, com $\alpha \geq 0$, um vetor distribuição de probabilidades. Como $0 < a + b < 2$, logo, $-1 < 1 - a - b < 1$, teremos $\lim_{n \rightarrow \infty} (1 - a - b)^n = 0$. Portanto, $\vec{\pi} = \left\{ \lim_{n \rightarrow \infty} S^n \right\} \vec{p}$, será

igual a

$$\begin{aligned} \vec{\pi} &= \lim_{n \rightarrow \infty} S^n \vec{p}, \\ \vec{\pi} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \begin{pmatrix} 1-a & b \\ a & 1-b \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} \alpha \\ 1-\alpha \end{pmatrix} \right\} = \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} \vec{\pi} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b & b \\ a & a \end{pmatrix} + \frac{(1-a-b)^n}{a+b} \begin{pmatrix} a & -b \\ -a & b \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \alpha \\ 1-\alpha \end{pmatrix}, \\ \vec{\pi} &= \frac{1}{a+b} \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

□

Lema 2. Em dimensão $N = 2$, dados possíveis estados $E = \{0, 1\}$, e dada matriz de transição biestocástica $B = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ a & 1-a \end{pmatrix}$, com¹ $0 < a < 1$, a matriz B^n , para $n \in \mathbb{N}$ é dada por:

$$B^n = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ a & 1-a \end{pmatrix}^n = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \frac{(1-2a)^n}{2a} \begin{pmatrix} a & -a \\ -a & a \end{pmatrix}. \quad (\text{A.12})$$

Demonstração. A prova será dada por indução. Suponhamos que a matriz B^n possa ser decomposta conforme descrita na Eq. A.12.

1. A decomposição é válida para $n = 1$,

$$B^1 = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ a & 1-a \end{pmatrix}^1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \frac{(1-2a)}{2a} \begin{pmatrix} a & -a \\ -a & a \end{pmatrix}. \quad (\text{A.13})$$

2. Como passo de indução, vamos supor que a afirmação dada pela Eq. A.12 seja verdadeira para algum $k > n$. Vamos mostrar que ela é válida para $k + 1$.

$$B^{k+1} = B^k \cdot B = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ a & 1-a \end{pmatrix}^{k+1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \frac{(1-2a)^{k+1}}{2a} \begin{pmatrix} a & -a \\ -a & a \end{pmatrix}. \quad (\text{A.14})$$

3. Finalmente, devido ao fato de $\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a & -a \\ -a & a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, teremos que $B^{k+1} = B^k B^1$.

□

¹Os casos $a = 0$ e $a = 1$ serão excluídos deste Lema por motivos óbvios.

Teorema (estado estacionário para cadeias de Markov com matrizes de transição biestocásticas – Teo. 6). *Seja a seguinte matriz: $B_\pi = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ e seja: $T_B(m) = \frac{(1-2a)^m}{2a} \begin{pmatrix} a & -a \\ -a & a \end{pmatrix}$. Em dimensão $N = 2$, dados possíveis estados $E = \{0, 1\}$, e dada matriz de transição biestocástica $B = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ a & 1-a \end{pmatrix}$, com: $0 < a < 1$, a matriz B^m é dada por:*

$$B^m = B_\pi + T_B(m) = \begin{pmatrix} 1-a & a \\ a & 1-a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \frac{(1-2a)^m}{2a} \begin{pmatrix} a & -a \\ -a & a \end{pmatrix}. \quad (\text{A.15})$$

Desse modo, a distribuição de probabilidades estacionária, para $m \rightarrow \infty$ é dada por: $\vec{\pi} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$.

Demonstração. Utilizando-se a decomposição demonstrada no Lema 2, e seja o vetor $\vec{p} = (\alpha, 1 - \alpha)^T$, com $\alpha \geq 0$, um vetor distribuição de probabilidades. Como $0 < a < 1$, logo, $-1 < 1 - 2a < 1$, isto é, $|1 - 2a| < 1$, portanto, teremos $\lim_{n \rightarrow \infty} (1 - 2a)^n = 0$. Portanto, $\vec{\pi} = \left\{ \lim_{n \rightarrow \infty} S^n \right\} \vec{p}$, será igual a igual a:

$$\begin{aligned} \vec{\pi} &= \lim_{n \rightarrow \infty} S^n \vec{p}, \\ \vec{\pi} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \begin{pmatrix} 1-a & a \\ a & 1-a \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} \alpha \\ 1-\alpha \end{pmatrix} \right\} = \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

$$\begin{aligned} \vec{\pi} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \frac{(1-2a)^n}{2a} \begin{pmatrix} a & -a \\ -a & a \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \alpha \\ 1-\alpha \end{pmatrix}, \\ \vec{\pi} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

□

APÊNDICE B – Funções de correlação entre primeiros e segundos vizinhos

Neste apêndice, iremos mostrar as funções de correlação entre primeiros vizinhos ($r = 1$) para o modelo de Heisenberg XXZ de $spin-1/2$. As funções de correlação entre dois pontos para este modelo na temperatura de $0K$ e no limite termodinâmico podem ser derivadas usando a técnica do ansatz de Bethe [133, 139]. As correlações entre $spin-spin$ entre os primeiros vizinhos para $\Delta > 1$ são dadas por Takahashi *et al.* em [135].

$$\begin{aligned}\langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle &= 1 + 2 \int_{-\infty+i/2}^{\infty+i/2} \frac{dx}{\sinh(\pi x)} \left(\cot(\nu x) \coth(\nu x) - \frac{x}{\sin^2(\nu x)} \right), \\ \langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rangle &= \int_{-\infty+i/2}^{\infty+i/2} \frac{dx}{\sinh(\pi x)} \left(\frac{x}{\sin^2(\nu x)} \cosh \nu - \frac{\cot(\nu x)}{\sinh \nu} \right),\end{aligned}$$

com $\nu = \cosh^{-1} \Delta$. Para $\Delta = 1$, temos $\langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rangle = \langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle = 1/3(1 - 4 \ln 2)$ e, para $\Delta \leq -1$, $\langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle = 1$ e $\langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rangle = 0$, ver [116]. Para $-1 < \Delta < 1$, as funções de correlação são dadas por Kato *et al.* na Ref. [136]:

$$\begin{aligned}\langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle &= 1 - \frac{2}{\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sinh x} \frac{x \cosh x}{\cosh^2(\Phi x)} + \frac{2 \cot(\pi \Phi)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sinh x} \frac{\sinh((1 - \Phi)x)}{\cosh(\Phi x)}, \\ \langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rangle &= \frac{\cos(\pi \Phi)}{\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sinh x} \frac{x \cosh x}{\cosh^2(\Phi x)} - \frac{1}{\pi \sin(\pi \Phi)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sinh x} \frac{\sinh((1 - \Phi)x)}{\cosh(\Phi x)},\end{aligned}$$

onde $\Phi = \frac{1}{\pi} \cos^{-1} \Delta$.

As funções de correlação entre segundos vizinhos ($r = 2$) para o modelo XXZ de $spins-1/2$. Na região $\Delta > 1$, temos as seguintes funções de correlação (veja [135]):

$$\begin{aligned}\langle \sigma_i^x \sigma_{i+2}^x \rangle &= \int_{-\infty+i/2}^{\infty+i/2} \frac{dx}{\sinh(\pi x)} \frac{1}{2} \left[-\frac{x}{\sin^2(\nu x)} \left(\frac{3 \sinh^2 \nu}{\sin^2(\nu x)} + 1 - 3 \cosh 2\nu \right) + \right. \\ &\quad \left. + \cot(\nu x) \left(\frac{3 \cosh(2\nu) \tanh(\nu)}{\sin^2(\nu x)} - \frac{4}{\sinh(2\nu)} \right) \right], \\ \langle \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z \rangle &= 1 + \int_{-\infty+i/2}^{\infty+i/2} \frac{dx}{\sinh(\pi x)} \left[\frac{x}{\sin^2(\nu x)} \left(\frac{3 \sinh^2 \nu}{\sin^2(\nu x)} - 1 - \cosh(2\nu) \right) \right] - \\ &\quad - \cot(\nu x) \left(\frac{3 \tanh \nu}{\sin^2(\nu x)} - 4 \coth(2\nu) \right),\end{aligned}$$

onde $\nu = \cosh^{-1} \Delta$, $\Delta \leq -1$, $\langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle = 1$, e $\langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rangle = 0$. Para $-1 < \Delta < 1$, temos, veja [137, 139]:

$$\begin{aligned}\langle \sigma_i^x \sigma_{i+2}^x \rangle &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sinh x} \left[\frac{\sinh(1 - \Phi)x}{\cosh(\Phi x)} \left(\frac{2}{\pi \sin(2\pi \Phi)} + \frac{3 \cos 2\pi \Phi \tan \pi \Phi}{\pi^3} x^2 \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\cosh x}{(\cosh \Phi x)^2} \left(\frac{\cos 2\pi \Phi}{\pi^2} x + \frac{(\sin \pi \Phi)^2}{\pi^4} x^3 \right) \right],\end{aligned}$$

e, também:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z \rangle &= 1 + 4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sinh x} \frac{\sinh(1-\Phi)x}{\cosh \Phi x} \left[\frac{\cot(2\pi\Phi)}{\pi} + \frac{3 \tan \pi\Phi}{2\pi^3} x^2 \right] - \\ &\quad - 4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sinh x} \frac{\cosh x}{(\cosh \Phi x)^2} \left[\frac{x}{2\pi^2} + \frac{(\sin \pi\Phi)^2}{2\pi^4} x^3 \right]. \end{aligned}$$