



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Programa de Pós-Graduação em Física

Marllos Eustáquio Fonseca Fernandes

**Teoria de controle ótimo aplicada a sistemas quânticos abertos**

São Carlos/SP  
2023

Marllos Eustáquio Fonseca Fernandes

## **Teoria de controle ótimo aplicada a sistemas quânticos abertos**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos - UFSCar como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Leonardo Kleber Castelano

São Carlos/SP  
2023

Fernandes, Marllos Eustáquio Fonseca

Teoria de controle ótimo aplicada a sistemas quânticos abertos / Marllos Eustáquio Fonseca Fernandes -- 2023. 107f.

Tese de Doutorado - Universidade Federal de São Carlos, campus São Carlos, São Carlos

Orientador (a): Leonardo Kleber Castelano

Banca Examinadora: Marcos Henrique Degani, Marcelo

Zoéga Maialle, Emanuel Fernandes de Lima, Luben

Cabezas Gómez, Leonardo Kleber Castelano

Bibliografia

1. Computação quântica. 2. Controle ótimo. 3. Sistemas quânticos abertos. I. Fernandes, Marllos Eustáquio Fonseca. II. Título.

Ficha catalográfica desenvolvida pela Secretaria Geral de Informática (Sin)

DADOS FORNECIDOS PELO AUTOR

Bibliotecário responsável: Ronildo Santos Prado - CRB/8 7325



# UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia  
Programa de Pós-Graduação em Física

---

## Folha de Aprovação

---

Defesa de Tese de Doutorado do candidato Marlllos Eustáquio Fonseca Fernandes, realizada em 10/11/2023.

### Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Leonardo Kleber Castelano (UFSCar)

Prof. Dr. Marcos Henrique Degani (UNICAMP)

Prof. Dr. Marcelo Zoéga Maialle (UNICAMP)

Prof. Dr. Emanuel Fernandes de Lima (UFSCar)

Prof. Dr. Luben Cabezas Gómez (USP)

## **Agradecimentos**

Agradeço ao Senhor Jesus, Filho de Deus, minha salvação e fortaleza, meu Deus em quem está toda a minha confiança e esperança, o que me sustenta e me ajuda em todos os momentos importantes da minha vida.

Agradeço de todo o coração à minha amada esposa, Carla Nunes, pelo seu amor, por estar sempre ao meu lado, compartilhando não apenas os momentos felizes, mas também os desafios e as conquistas.

Agradeço ao meu estimado orientador, o Prof. Dr. Leonardo Kleber Castelano, pela sua incansável dedicação, perseverança e comprometimento ao longo desse anos, onde sua orientação desempenhou um papel fundamental e indispensável para o conclusão dessa tese.

Agradeço ao Prof. Dr. Emanuel Fernandes de Lima pelas valiosas contribuições nos artigos que resultaram na tese. Sua participação foi sempre valiosa e gratificante. Também agradeço ao Prof. Dr. Felipe Fernandes Fanchini por suas importantes contribuições ao longo da elaboração dos artigos.

Agradeço à CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro, sem o qual esse trabalho não seria possível.

## Resumo

Esta tese, fundamentada na área da computação quântica, explora tópicos diversos e cruciais para o avanço desta área. Primeiramente, introduzimos uma inovadora solução de “double-bang” usando a teoria do controle ótimo para a preparação de estados no contexto do teletransporte quântico. Combinada ao protocolo de teletransporte por porta adiabática, essa abordagem oferece uma maneira experimentalmente viável para a implementação da computação quântica universal. Em seguida, direcionamos nosso foco para a computação quântica adiabática, revelando a robustez do protocolo de emaranhamento adiabático ao ruído e propondo melhorias para o protocolo de teletransporte através da inclusão de campos de controle locais. Em conjunto, esses estudos oferecem contribuições para o avanço da computação quântica, proporcionando perspectivas práticas para futuras implementações em dispositivos NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum). Por fim, aplicamos o método de Krotov para encontrar controles otimizados em sistemas quânticos abertos, destacando a eficácia da otimização não unitária na preparação de estados, embora a otimização unitária muitas vezes se equipare na implementação de portas quânticas.

**Palavras-chave:** Computação Quântica, Emaranhamento, Teletransporte, Controle Ótimo, Método Krotov, Teorema Adiabático, Dissipação.

## Abstract

This thesis, grounded in the field of quantum computing, explores diverse and crucial topics for the advancement of this area. Firstly, we introduce an innovative “double-bang” solution using optimal control theory for state preparation in the context of quantum teleportation. Combined with the adiabatic door teleportation protocol, this approach provides an experimentally viable way for the implementation of universal quantum computing. Subsequently, we shift our focus to adiabatic quantum computing, revealing the robustness of the adiabatic entanglement protocol to noise and proposing enhancements to the teleportation protocol through the inclusion of local control fields. Collectively, these studies contribute to the progress of quantum computing, offering practical insights for future implementations in Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) devices. Finally, we apply the Krotov method to find optimized controls in open quantum systems, highlighting the effectiveness of non-unitary optimization in state preparation, although unitary optimization often proves equivalent in the implementation of quantum gates.

**Keywords:** Quantum Computing, Entanglement, Teleportation, Optimal Control, Krotov Method, Adiabatic Theorem, Dissipation.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>15</b>
<b>2</b>	<b>Princípios e Conceitos</b>	<b>20</b>
2.1	Qubits, Qutrits e Qudits . . . . .	20
2.2	Operador densidade . . . . .	21
2.3	Fidelidade . . . . .	23
2.4	Emaranhamento . . . . .	24
2.5	Teletransporte . . . . .	26
2.6	Portas lógicas . . . . .	29
2.6.1	Portas de Pauli como evolução temporal . . . . .	29
2.6.2	Porta NOT . . . . .	31
2.6.3	Porta Hadamard . . . . .	31
2.6.4	Controlled-NOT . . . . .	32
2.7	Ruídos e canais . . . . .	34
2.8	Equação de Lindblad . . . . .	36
2.9	Cálculo variacional . . . . .	38
2.10	Controle quântico ótimo . . . . .	42
2.10.1	Caso dissipativo . . . . .	46
2.10.2	Implementação do Krotov . . . . .	47
<b>3</b>	<b>Teoria de controle ótimo aplicada à computação quântica adiabática considerando sistemas fechados</b>	<b>49</b>
3.1	Introdução . . . . .	49
3.2	O problema de controle . . . . .	51
3.3	Método de otimização TBQCP . . . . .	56
3.4	Algoritmo de Otimização Aproximada Quântica (QAOA) . . . . .	57
3.5	Protocolo de Teletransporte . . . . .	58
3.6	Resultados numéricos . . . . .	59



<b>4</b>	<b>Método de Krotov aplicado à computação quântica adiabática considerando sistemas abertos</b>	<b>66</b>
4.1	Introdução . . . . .	66
4.2	Protocolo de emaranhamento adiabático . . . . .	67
4.3	Protocolo de teletransporte adiabático . . . . .	70
4.4	Conclusão . . . . .	78
<b>5</b>	<b>Método de Krotov aplicado a sistemas quânticos abertos</b>	<b>79</b>
5.1	Introdução . . . . .	79
5.2	Controle Quântico Aplicado a um Sistema Quântico com Dissipação .	80
5.3	Sistemas Simples . . . . .	82
5.3.1	Preparação de Estado . . . . .	83
5.3.2	Porta Quântica . . . . .	85
5.4	Efeitos de vazamento . . . . .	91
5.5	Conclusão . . . . .	94
	<b>Conclusão</b>	<b>96</b>
	<b>Apêndice A Notas sobre bra kets</b>	<b>98</b>

# Lista de Figuras

2.1	Esfera de Bloch, uma esfera de raio unitário, utilizada para representar todas as superposições de estados $ \psi\rangle$ de um qubit. . . . .	22
2.2	Função base $f(x)$ (linha preta), uma escolha arbitraria de variação infinitesimal $\delta f(x)$ e a função variada $f(x) + \delta f(x)$ (linha vermelha). . . . .	38
3.1	Valor médio $\langle H_1(T) \rangle$ como uma função do tempo final de evolução, usando o primeiro esquema (curva vermelha pontilhada), o segundo esquema (curva preta sólida), o terceiro esquema (curva laranja pontilhada) e o quarto esquema (curva azul sólida) de evolução temporal. A curva preta tracejada indica o menor autovalor de $H_1$ . . . . .	60
3.2	Os painéis (a) e (c) mostram o controle $\varepsilon_0(t)$ de 0 a 1400 iterações do método TBQCP, com passo de 100 iterações, para o segundo e terceiro esquemas, respectivamente. O número de iterações aumenta na direção indicada pelas setas e o gradiente de cores. Assim, quanto mais escuro for a cor, maior será o número de iterações no TBQCP. A fidelidade $F(T)$ como função do número de iterações no método TBQCP, usando o segundo e terceiro esquemas, são mostradas nos painéis (b) e (d), respectivamente. . . . .	61
3.3	Controles otimizados $\varepsilon_0(t)$ (linhas tracejadas) e $\varepsilon_1(t)$ (linhas sólidas) em função do tempo para todos os esquemas considerados para o tempo final $T = 0.6\tau_0$ . A otimização de dois controles, a otimização de um controle e o esquema QAOA são mostrados nos painéis (a) a (c), respectivamente. . . . .	62
3.4	Controles otimizados $\varepsilon_0(t)$ (linhas tracejadas) e $\varepsilon_1(t)$ (linhas sólidas) em função do tempo para todos os esquemas considerados para o tempo final $T = 1.11\tau_0$ . A otimização de dois controles, a otimização de um controle e o esquema QAOA são mostrados nos painéis (a) a (c), respectivamente. . . . .	62

3.5	Controles otimizados $\varepsilon_0(t)$ (linhas tracejadas) e $\varepsilon_1(t)$ (linhas sólidas) em função do tempo para todos os esquemas considerados para o tempo final $T = 1.8\tau_0$ . A otimização de dois controles, a otimização de um controle e o esquema QAOA são mostrados nos painéis (a) a (c), respectivamente. . . . .	63
3.6	Custo energético em função do tempo final para o primeiro (curva pontilhada vermelha), segundo (curva sólida preta), terceiro (curva pontilhada laranja) e quarto (curva sólida azul) esquemas de otimização.	64
3.7	No painel (a), traçamos a fidelidade em função da magnitude $\alpha$ do tipo mais agressivo de erro sistemático considerando o primeiro (curva pontilhada vermelha) e o segundo (curva sólida preta) esquemas de evolução temporal quando $T = 1.11\tau_0$ . No painel (b), traçamos a fidelidade em função de $\alpha$ para o terceiro (curva sólida azul) e o quarto (curva pontilhada laranja) esquemas de evolução temporal quando $T = 1.57\tau_0$ . . . . .	65
4.1	Fidelidade avaliada pela Eq. (4.7) para o protocolo de emaranhamento adiabático considerando erros de dephasing (painel (a)) e de amplitude-damping (painel (b)) em função da taxa de decaimento $\gamma$ , utilizando a função de controle otimizada obtida a partir da dinâmica unitária (curva pontilhada azul) e da dinâmica não-unitária (curva contínua laranja) . . . . .	68
4.2	Funções de controle otimizadas $\varepsilon_i(t)$ obtidas com a restrição de evoluir o sistema do estado da Eq.(4.4) para o estado da Eq.(4.5). O painel (a) refere-se a uma otimização unitária, que não depende do tipo de ruído. Os painéis (b) e (c) mostram as funções de controle otimizadas para uma taxa de decaimento fixa $\gamma = 0.1$ , considerando os erros de dephasing e amplitude-damping, respectivamente. . . . .	68
4.3	População dos estados em função do tempo para o protocolo de emaranhamento adiabático, resultante da evolução unitária, mostrado no painel (a). Os painéis (b) e (c) mostram a população dos estados em função do tempo para o protocolo de emaranhamento adiabático com uma taxa de decaimento fixa $\gamma = 0.1$ , resultante dos ruídos de dephasing e amplitude-damping, respectivamente. . . . .	69
4.4	Fidelidade avaliada pela Eq.(4.7) para o protocolo de teletransporte considerando erros de dephasing (painel (a)) e de amplitude-damping (painel (b)) em função da taxa de decaimento $\gamma$ . A fidelidade avaliada para Hamiltonianos de dois controles do tipo da Eq.(4.1) obtidos a partir da dinâmica unitária (não unitária) é mostrada pela curva pontilhada azul (curva contínua laranja). . . . .	70

4.5	Funções de controle otimizadas $\varepsilon_i$ obtidas para o protocolo de teletransporte adiabático usando o Hamiltoniano descrito nas equações (4.8) e (4.9). O painel (a) refere-se a uma otimização unitária ( $\gamma = 0$ ). Os painéis (b) e (c) mostram as funções de controle otimizadas para uma taxa de decaimento fixa $\gamma = 0.1$ considerando os erros de dephasing e amplitude-damping, respectivamente. . . . .	71
4.6	População dos estados em função do tempo para o protocolo de teletransporte adiabático considerando duas funções de controle, resultantes da evolução unitária mostrada no painel (a). Os painéis (b) e (c) mostram a população dos estados em função do tempo para o protocolo adiabático com uma taxa de decaimento fixa $\gamma = 0.1$ resultante dos ruídos de dephasing e amplitude-damping, respectivamente. . . . .	72
4.7	A fidelidade avaliada pela Equação (4.7) para o protocolo de teletransporte, considerando erros de dephasing (painel (a)) e amplitude-damping (painel (b)), é mostrada como função da taxa de decaimento $\gamma$ . A fidelidade é avaliada para as funções de controle otimizadas do Hamiltoniano da Equação (4.10), obtidas a partir da dinâmica unitária (curva pontilhada azul) e não unitária (curva contínua laranja). 75	75
4.8	As funções de controle otimizadas $\varepsilon_i$ obtidas para o protocolo de teletransporte adiabático usando o Hamiltoniano descrito na Equação (4.10) são mostradas na figura. O painel (a) se refere a uma otimização unitária ( $\gamma = 0$ ). Os painéis (b) e (c) mostram as funções de controle otimizadas para uma taxa de decaimento fixa de $\gamma = 0.1$ , considerando os erros de dephasing e amplitude-damping, respectivamente. . . . .	76
4.9	A população dos estados em função do tempo para o protocolo de teletransporte adiabático considerando três funções de controle, resultantes da evolução unitária, é mostrada no painel (a). Os painéis (b) e (c) mostram a população dos estados em função do tempo para o protocolo de teletransporte adiabático com uma taxa de decaimento fixa de $\gamma = 0.1$ , resultante dos ruídos de dephasing e de amplitude-damping, respectivamente. . . . .	77
4.10	A fidelidade média, avaliada a partir da Eq. (4.12), considerando $N=20000$ estados iniciais aleatórios, como função da taxa de decaimento $\gamma$ . Nos painéis (a) e (b), plotamos, respectivamente, os resultados para os tipos de erro de dephasing e de amplitude-damping, considerando a fidelidade média obtida para duas $\langle F_\gamma^2 \rangle$ e três funções de controle $\langle F_\gamma^3 \rangle$ . . . . .	77

- 5.1 Fidelidade avaliada pela Eq. (5.13) para um qubit considerando erros de dephasing (painel (a)) e amplitude-damping (painel (b)) em função da taxa de decaimento  $\gamma$  usando a função de controle otimizada obtida da dinâmica unitária (curva sólida vermelho) e não-unitária (curva pontilhada azul). Os resultados correspondentes para um qutrit são mostrados no painel (c) (dephasing) e no painel (d) (amplitude-damping). 85
- 5.2 Fidelidade de três estados avaliada por Eq. (5.16) para um qubit considerando dephasing (painel (a)) e amplitude-damping (painel (b)) em função da taxa de decaimento  $\gamma$ , usando a função de controle otimizada obtida da dinâmica unitária (curva sólida preta) e não unitária (curva pontilhada verde). Os resultados correspondentes para um qutrit, onde a fidelidade de quatro estados é avaliada por Eq. (5.16) considerando dephasing e amplitude-damping, são mostrados nos painéis (c) e (d), respectivamente. . . . . 87
- 5.3 Fidelidade média avaliada pela Eq. (5.17), respectivamente para um qubit considerando dephasing (painéis (a)) e amplitude-damping (painéis (b)) em função da taxa de decaimento  $\gamma$ , usando a função de controle otimizada obtida da dinâmica unitária (curva sólida azul) e não unitária (curva pontilhada laranja). As cruzes vermelhas indicam a fidelidade média considerando um conjunto diferente de estados iniciais apenas para o caso do qubit, conforme proposto em Ref. [17]. Da mesma forma para o qutrit, a fidelidade média é mostrada no painel (c) (dephasing) e no painel (d) (amplitude-damping). . . . . 88
- 5.4 Funções de controle otimizadas obtidas para a implementação de uma porta quântica para um qubit considerando dephasing (painel (a)) e amplitude-damping (painel (b)) para diferentes valores da taxa de decaimento  $\gamma$ . . . . . 89
- 5.5 Os painéis (a) e (c) referem-se ao erro de dephasing, enquanto os painéis (b) e (d) referem-se ao erro de amplitude-damping, respectivamente, para o qubit e o qutrit. Os resultados para a fidelidade média para um valor fixo da taxa de decaimento  $\gamma/\omega_0 = 0.01$ , considerando as portas quânticas  $U_1$ ,  $U_2$ ,  $U_3$ , e  $U_4$ , usando a função de controle otimizada obtida a partir da dinâmica unitária (símbolos laranja) e dinâmica não unitária (símbolos azuis). . . . . 89

5.6	<p>A fidelidade média avaliada pela Eq. (5.17) para estados de quatro níveis como função da taxa de decaimento <math>\gamma</math>, utilizando a função de controle otimizada obtida a partir da dinâmica unitária (curvas sólidas verdes) e dinâmica não unitária (pontos laranja). Os painéis (a) a (d) correspondem aos casos (i) a (iv) das combinações dos operadores de Lindblad. As curvas sólidas cinzas nos painéis (b) e (c) representam a fidelidade média considerando uma função de controle de teste diferente, na qual a função na Eq. (5.11) é multiplicada por <math>\sin(\omega_{i,0}t)</math>, onde <math>\omega_{i,0}</math> é a frequência de Bohr associada aos estados <math> 0\rangle</math> e <math> i\rangle</math>, com <math>i = 3</math> e <math>2</math>, respectivamente. . . . .</p>	92
5.7	<p>População do sistema de quatro níveis sob a dissipação descrita pelo operador de Lindblad <math>L_1 =  0\rangle\langle 1 </math> é mostrada nos painéis (a) e (b) em função do tempo para <math>\gamma = 0</math> e <math>\gamma/\omega_0 = 0.1\omega_0</math>, respectivamente. Os painéis (c) e (d) mostram os campos otimizados para a otimização unitária e não unitária, respectivamente. . . . .</p>	93

# Lista de Tabelas

2.1	Portas lógicas que Bob deve aplicar em seu qubit a fim de realizar a decodificação, com base nos bits enviados por Alice. . . . .	28
2.2	Ação da porta CNOT, onde o controle é o primeiro qubit. . . . .	33
2.3	Lista breve de algumas portas quânticas. . . . .	33
2.4	Efeitos de canais de ruído na esfera de Bloch, com $p = 0.6$ . . . . .	36
4.1	Fidelidades obtidas ao acrescentar um terceiro Hamiltoniano de controle $H_2$ . A adição de $H_2$ resultou em melhorias na fidelidade. O estado inicial e o respectivo alvo são os estados das equações 4.11. . .	74

# Capítulo 1

## Introdução

Em 1947, quando surgiram os primeiros transistores, estes tinham cerca de  $1 \text{ cm}^2$ , e não pareciam tão motivadores para indicar que uma enorme revolução aconteceria em um curto intervalo de tempo[1]. Quem poderia prever que apenas décadas depois, esse centímetro quadrado poderia conter mais de 2 milhões de transistores, desencadeando uma revolução de proporções inimagináveis? Esse progresso foi possível graças ao enorme esforço científico e tecnológico empreendido pelos pioneiros da computação, que souberam unir a física e a engenharia[2]. Atualmente, protótipos de hardwares podem ser fabricados em escala atômica, onde efeitos quânticos podem ser observados. Os benefícios dessa diminuição de escala são múltiplos e exponenciais. Primeiro, devido ao princípio da superposição, o número de estados operáveis é literalmente ilimitado, ao contrário da computação clássica que se limita a apenas 2 estados por bit[3]. Outra característica fundamental da mecânica quântica é o emaranhamento entre estados, que desempenha um papel central na computação quântica. Ele permite a manipulação de informações quânticas de maneira altamente eficiente e desbloqueia o potencial de processamento paralelo que torna os computadores quânticos tão promissores para resolver problemas complexos em áreas como criptografia, simulação quântica e otimização[4]. Atualmente estamos vivendo a era da computação quântica que é uma área muito desafiadora, estimulante e apresenta grandes promessas de benefícios futuros.

A computação clássica, utilizada em dispositivos eletrônicos comuns como computadores, notebooks e celulares, é baseada no conceito clássico de bit (binary digit). Um bit pode ser qualquer sistema físico que apresente dois estados distintos, tais como desmagnetizado/magnetizado, sem corrente elétrica/com corrente elétrica, não polarizado/polarizado, entre outros. Esses dois estados são comumente representados por 0 ou 1, e é sobre esse fundamento que toda computação clássica é construída.



Um bit clássico pode ocupar somente um desses estados em um determinado instante, ou seja, o estado do bit é ou 0 ou 1. Por outro lado, a computação quântica se baseia no conceito de bit quântico ou qubit. Um qubit pode ser qualquer sistema físico regido pela mecânica quântica que possui dois estados, geralmente expresso como  $|0\rangle$  ou  $|1\rangle$ , de maneira similar ao bit clássico. Entretanto, um qubit pode assumir não só os estados  $|0\rangle$  ou  $|1\rangle$ , mas infinitas combinações (lineares) desses estados ao mesmo tempo. Essa propriedade é conhecida como superposição e pode ser representada por  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ , onde  $a$  e  $b$  são números complexos que satisfazem a condição  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ . Em outras palavras, enquanto um bit clássico tem apenas dois estados possíveis, um qubit possui infinitos estados.

A computação quântica busca explorar as propriedades quânticas dos qubits, tais como a superposição, que permite que um qubit possua múltiplos estados simultaneamente. Além disso, o emaranhamento estabelece uma correlação entre dois qubits, de modo que a mudança em um qubit seja refletida instantaneamente em outro, independentemente da sua localização. Existe também o teletransporte, que possibilita a transferência instantânea e segura da informação quântica de um qubit para outro, mesmo a grandes distâncias, utilizando emaranhamento quântico e medições. O teletransporte não envolve a transferência física de partículas, mas a transferência de propriedades quânticas de um estado entre partículas previamente emaranhadas. A utilização dessas propriedades permite elevar a computação quântica a patamares muito acima da computação clássica, possibilitando a realização de tarefas que são impossíveis para a computação clássica. Por exemplo, a fatoração de um inteiro de 1000 dígitos levaria um computador clássico 1 milhão de anos, enquanto um computador quântico tem-se a expectativa de que essa tarefa leve apenas alguns minutos utilizando o algoritmo de Shor[5].

Até agora, falamos um pouco das vantagens e benefícios da computação quântica. Entretanto, ela apresenta desafios igualmente significativos, relacionados com a dissipação e a decoerência dos qubits, que representam algumas das maiores dificuldades para a realização da computação quântica. Qualquer sistema quântico interage com o ambiente ao seu redor e sofre efeitos dissipativos como consequência. Essas interações podem ocorrer devido a flutuações de correntes em circuitos eletrônicos próximos ou afastados, radiação no ambiente ou uma simples troca de calor. Devido a essas interações, os sistemas quânticos são sistemas abertos. Um sistema quântico fechado é uma idealização onde não ocorrem interações com o ambiente ou elas são minimizadas por meio de medidas de isolamento. No caso ideal, o sistema é regido pela equação de Schrödinger, descrevendo a evolução do seu estado. No entanto, sistemas quânticos reais são abertos e descritos pela equação de Liouville-von Neumann, onde termos relacionados à dissipação são considerados. A decoerência é o processo pelo

qual os sistemas quânticos perdem suas propriedades quânticas devido à interação com ambiente ao redor. Esse processo faz com que os qubits se tornem bits clássicos e que a tarefa computacional quântica seja perdida.

A construção de um computador quântico herda todas as complicações de sistemas quânticos abertos. Na computação quântica, ainda temos que controlar os qubits com perfeição, mesmo na presença de efeitos de decoerência. Portanto, realizar a computação quântica é uma tarefa complexa e delicada.

Na prática, diversos métodos são empregados para proteger os sistemas quânticos da decoerência, como a codificação de redundância, correção de erros e técnicas de desacoplamento de spin. Além disso, os qubits geralmente são mantidos em ambientes de baixas temperaturas para minimizar as interações com o ambiente e reduzir a dissipação.

Nessa tese iremos utilizar a teoria de controle ótimo em sistemas quânticos abertos com o objetivo de melhorar a performance do sistema quântico de interesse através de campos externos dependentes do tempo. No **capítulo 2**, faremos uma breve revisão de conceitos fundamentais de mecânica quântica essenciais para a compreensão da computação quântica. Abordaremos temas como qubits, operador densidade, fidelidade, teoria de controle ótimo, entre outros. Esses conceitos são fundamentais para entender as ideias que serão desenvolvidas ao longo dessa tese.

No **capítulo 3**, vamos analisar o problema de encontrar um estado alvo desconhecido que codifica a solução de uma determinada tarefa computacional utilizando a Teoria do Controle Ótimo. Neste caso, a evolução do sistema é governada por uma combinação de um Hamiltoniano de controle e um Hamiltoniano do problema, cada um modulado por uma função de controle independente. Também assumimos que os controles são limitados, ou seja, impondo o vínculo de que as amplitudes das funções estejam acima de um valor mínimo e abaixo de um valor máximo. Observa-se que para essa situação, existem dois regimes dependentes do tempo total de evolução: (i) para tempos suficientemente longos, existem soluções ótimas em que o estado alvo pode ser obtido exatamente; (ii) para tempos curtos, as soluções ótimas não conseguem preparar perfeitamente o estado fundamental do Hamiltoniano do problema. No entanto, identificamos a existência de um tempo mínimo, que é o menor tempo de evolução para o qual o estado alvo pode ser preparado exatamente. Se os gradientes do Hamiltoniano de controle associado em relação aos controles forem positivos e o tempo de evolução final for menor que o tempo mínimo, demonstramos que a solução ótima é obtida simplesmente definindo ambas as funções de controle em seus valores máximos durante toda a evolução. Chamamos esse tipo de solução de “double-bang”. Para exemplificar essa solução, utilizamos o problema de teletransporte quântico,

destacando o uso do método de algoritmos quânticos aproximados de otimização (QAOA) em plataformas de computação quântica de escala intermediária ruidosas (NISQ). Verificamos numericamente os resultados analíticos obtidos para o caso geral, ou seja, de que a solução “double-bang” é uma solução ótima para tempos menores que o tempo mínimo.

No **capítulo 4**, abordamos a questão de alcançar um estado alvo desconhecido que contém a solução de uma tarefa computacional específica no contexto de controle ótimo aplicado a sistemas quânticos abertos. Exploramos os Algoritmos Quânticos Adiabáticos (AQAs) que utilizam o teorema adiabático para encontrar soluções computacionais de certos problemas [23, 24]. Nesse caso, foram testados os protocolos de teletransporte e emaranhamento [25, 26], destacando a importância dessas técnicas na busca de soluções em meio às limitações impostas pelo teorema adiabático, ou seja, o tempo de evolução deve ser suficientemente longo para que o estado fundamental do Hamiltoniano instantâneo seja obtido. Nosso foco está na utilização da teoria de controle ótimo com o objetivo de conseguir encontrar funções de controle capazes de executar o protocolo desejado em um tempo bem mais curto que o necessário no caso adiabático. Também iremos considerar que os sistemas estudados nesse capítulo sejam abertos, o que pode ser descrito matematicamente através da equação mestra Markoviana. Nesse caso, vimos que a otimização das funções de controle para o caso do protocolo de emaranhamento é capaz de obter um alto grau de fidelidade. No caso do protocolo de teletransporte a otimização se torna mais eficiente se campos locais dependentes do tempo forem considerados em conjunto com as funções de controle.

No **capítulo 5**, vamos utilizar o método de Krotov (KM) para estudar sistemas quânticos abertos. Usualmente, sistemas quânticos interagem com o ambiente externo ao seu redor e essa interação gera erros nas operações quânticas. Portanto, conseguir realizar tarefas quânticas neste contexto é crucial para a implementação da computação quântica na prática [6–9]. Existem estratégias para lidar com os erros causados pelo ambiente externo, tais como: subespaços sem decoerência [10–12], desacoplamento dinâmico [13, 14], subsistemas sem ruídos [15], e engenharia espectral [16]. No entanto, optaremos pelo controle ótimo numérico, com destaque para o KM [17–21]. Nesse caso, vamos nos focar na preparação de estados e na implementação de portas quânticas para sistemas de um qubit (sistema de dois níveis) e um qutrit (sistema de três níveis). Vamos também investigar sistemas que possuem níveis de vazamento, ou seja, com níveis extras aos níveis computacionais que interferem na dinâmica do sistema. Tal estrutura realmente acontece na prática, por exemplo, em qubits supercondutores [22]. Iremos comparar a otimização não unitária, quando considera-se a dissipação na otimização, com a otimização unitária, quando não

leva-se em conta a dissipação na otimização. Verificamos que a otimização não unitária supera a unitária na preparação do estado, mas ambas tem desempenho similar na implementação de portas quânticas. Esse resultado é bem interessante, pois torna a otimização menos exigente computacionalmente e independente da taxa de decaimento e do tipo de ruído.

Por fim, apresentamos a conclusão dessa tese. Na qual ressaltamos os resultados obtidos que visam contribuir para o avanço das técnicas de computação quântica, abrindo caminho para a implementação prática de algoritmos em dispositivos NISQ e fornecendo informações que julgamos interessantes para o desenvolvimento de futuros computadores quânticos.

# Capítulo 2

## Princípios e Conceitos

### 2.1 Qubits, Qutrits e Qudits

Qubit é a unidade fundamental de processamento de informação quântica, também conhecido como bit quântico. Assim como vários sistemas clássicos podem constituir o bit clássico, qualquer sistema quântico com dois níveis de energia, em princípio, pode ser um qubit. O termo deriva da combinação das palavras *quantum* e *bit*. Os autoestados do qubit são representados genericamente como  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  e formam uma base para o espaço de Hilbert do sistema.

Sistemas quânticos com mais de dois níveis também podem ser considerados como qubits, desde que apenas dois de seus níveis sejam relevantes durante a utilização. Porém, se mais níveis são relevantes, o sistema será denominado qutrit para três níveis ou qudit para uma dimensão geral  $d$ , que não se classifica como qubit ou qutrit. De forma similar aos qubits, a base do espaço de Hilbert é representada por  $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots\}$  conforme a dimensão do qudit.

Os qubits são os mais comuns e amplamente utilizados, mas é importante mencionar a existência de outras bases mais complexas que podem ser úteis em situações específicas, com vantagens e desvantagens.

Como exemplos de sistemas quânticos utilizados como qubits em computadores quânticos, podemos citar

- Qubits supercondutores: Os qubits são construídos a partir de circuitos supercondutores, onde os estados quânticos são codificados nas correntes elétricas e

tensões presentes nos circuitos.

- Qubits iônicos: Os qubits são íons aprisionados em armadilhas eletromagnéticas. A codificação dos estados quânticos é realizada com base nos níveis de energia dos íons.
- Qubits de spin: Essa abordagem envolve a utilização do spin de elétrons em átomos ou spin de núcleos atômicos como qubits. A codificação dos estados quânticos é feita com base nas diferentes componentes do spin.

Existem muitas outras abordagens, que utilizam diferentes sistemas físicos para a implementação de qubits.

O estado de um qubit por ser representado com uma combinação linear dos estados da base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , expresso como

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad (2.1)$$

onde  $a$  e  $b$  são números complexos que atendem a condição  $|a| + |b| = 1$ , isto é,  $|\psi\rangle$  é um estado com norma 1. Uma outra forma de representar o estado de um qubit é através de

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\varphi} \sin(\theta/2)|1\rangle, \quad (2.2)$$

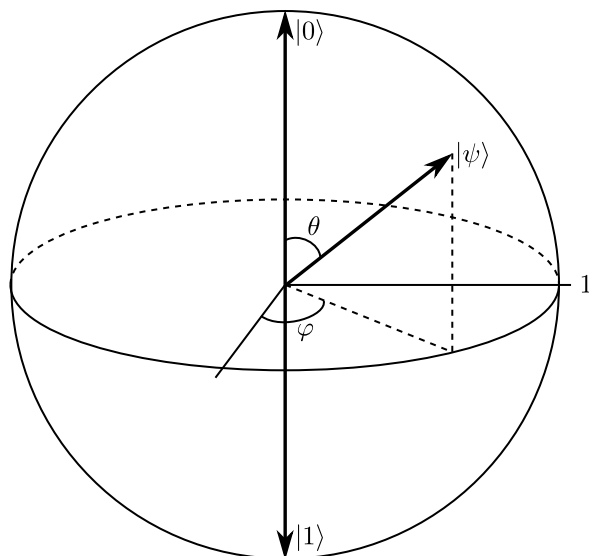
$\theta \in [0, \pi]$  e  $\varphi \in [0, 2\pi]$ . Os ângulos  $\theta$  e  $\varphi$  determinam a direção arbitrária de um vetor unitário  $\mathbf{n}$  de modo que a Eq.(2.2) é o autoestado  $|+\frac{\hbar}{2}\rangle$  do observável  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}$ . Esses valores  $\theta$  e  $\varphi$  podem ser interpretados como coordenadas esféricas e descrevem uma esfera de raio unitário denominada por esfera de *Bloch*, onde temos representados todos os estados possíveis de um qubit.

## 2.2 Operador densidade

Todo sistema quântico representado pelo vetor de estado  $|\psi\rangle$  pode também ser expresso por um operador denominado matriz densidade ou operador densidade  $\rho$ , definido por

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (2.3)$$

Quando o estado do sistema é exatamente um estado  $|\psi\rangle$ , o operador densidade  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  representa um estado puro. No entanto, em muitas situações, não é possível conhecer precisamente o estado do sistema, como no caso da decoerência, por exemplo. Nessas circunstâncias, é necessário descrever o estado do sistema como



**Figura 2.1:** Esfera de Bloch, uma esfera de raio unitário, utilizada para representar todas as superposições de estados  $|\psi\rangle$  de um qubit.

um ensemble, uma mistura estatística de diferentes estados puros. Isso só é viável através do uso do operador densidade não sendo mais possível usar o vetor de estado  $|\psi\rangle$ .

Em termos da matriz densidade, a decoerência se reflete na anulação dos elementos fora da diagonal principal, enquanto os elementos da diagonal principal continuam indicando as proporções das populações nos estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , sem interferência entre eles. Essa condição caracteriza o cenário de probabilidade clássica e, dentro do contexto quântico, é denominada mistura de estados.

O operador densidade é uma forma adequada e eficiente de representar o estado de sistemas quânticos, tanto puros quanto misturas. Matematicamente, o operador densidade possui propriedades importantes, que podemos resumir da seguinte forma: é um operador Hermitiano, não-negativo e possui traço unitário. Para estados puros, temos a propriedade de que  $\text{Tr}(\rho^2) = 1$ , enquanto que para mistura de estados, temos  $\text{Tr}(\rho^2) < 1$ .

O operador densidade, puro ou mistura, pode ser expresso como:

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (2.4)$$

onde  $|\psi_i\rangle$  são estados puros que ocorrem na proporção  $p_i$ , sendo  $\sum_i p_i = 1$ . Nessa expressão, um estado puro ocorre quando existe apenas um componente, como por exemplo  $|\psi_1\rangle$ .

Em termos da esfera de Bloch, o operador densidade é expresso como

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (2.5)$$

onde  $\mathbf{r}$  é a posição na superfície da esfera, para estados puros, ou no interior da esfera, para estados de mistura.

O estado puro  $|\psi(t)\rangle$ , obedece a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H|\psi(t)\rangle, \quad (2.6)$$

enquanto que a matriz densidade, representando um estado puro ou mistura, é governada pela equação de Liouville-von Neumann, dada por

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H, \rho(t)]. \quad (2.7)$$

O valor médio de um observável  $A$ , quando o sistema encontra-se no estado  $\rho$  é dado por

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A). \quad (2.8)$$

A abordagem em sistemas quânticos, utilizando matriz densidade, é crucial, principalmente em sistemas onde os efeitos dissipativos estão presentes.

## 2.3 Fidelidade

Sejam  $\rho_1$  e  $\rho_2$  duas matrizes densidade que representam dois estados quânticos quaisquer. Para determinar o quão “próximos” esses dois estados estão um do outro, utilizamos o conceito de fidelidade, definido como:

$$F(\rho_1, \rho_2) = \left( \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho_2} \rho_1 \sqrt{\rho_2}} \right)^2. \quad (2.9)$$

Se pelo menos um desses estados for puro, por exemplo,  $\rho_1 = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ , então a equação acima pode ser simplificada para

$$F(|\psi_1\rangle, \rho_2) = \langle\psi_1|\rho_2|\psi_1\rangle. \quad (2.10)$$



No caso em que ambos os estados são puros, temos

$$F(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) = |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2. \quad (2.11)$$

## 2.4 Emaranhamento

A computação quântica se baseia em alguns princípios importantes da mecânica quântica, um desses princípios envolve uma propriedade de sistemas quânticos conhecida como *emaranhamento*. Assim como boa parte da mecânica quântica, o emaranhamento também é um desafio a nossa intuição clássica e constitui um conceito central na computação quântica.

Como é conhecido, alguns erros cometidos por Einstein, na verdade se mostraram depois como contribuições significativas para a física, e mesmo para a computação quântica, que sequer era imaginada em sua época. O paradoxo EPR, proposto em 1935 por Einstein, Podolsky e Rosen, foi elaborado com objetivo ser uma crítica para teoria quântica, como teoria fundamental, mas em vez disso, desencadeou intensos debates e estudos, dos quais emergiu uma valiosa compreensão da teoria quântica, e a descoberta fundamental: o emaranhamento quântico.

Para abordarmos o emaranhamento, precisamos considerar como os sistemas quânticos podem se combinar para formar sistemas compostos. Essa combinação é realizada por meio do produto tensorial de espaços, que estabelece uma conexão entre o emaranhamento e como sistemas compostos são representados no espaço de Hilbert.

Quando dois sistemas quânticos separados são combinados a fim de formar um sistema composto maior, o espaço de Hilbert do sistema composto é representado pelo produto tensorial dos espaços de Hilbert dos sistemas individuais. Se denotarmos por  $\mathcal{H}_1$  o espaço de Hilbert do sistema  $S_1$  e por  $\mathcal{H}_2$  o espaço de Hilbert do sistema  $S_2$ , então o espaço de Hilbert do sistema composto  $S$  é dado por  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ .

Se  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1$  e  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_2$ , então o estado global  $|\chi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$  pertence ao espaço  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Estados como esse, que podem ser decompostos como produto tensorial, são chamados de estados não emaranhados. Entretanto, se um estado  $|\chi\rangle$  não pode ser decomposto em um produto tensorial, dizemos que ele constitui um estado emaranhado.

Exemplos tradicionais de estados emaranhados são os chamados estados de Bell,

normalmente representados como

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \quad (2.12)$$

$$|\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle) \quad (2.13)$$

$$|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) \quad (2.14)$$

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \quad (2.15)$$

Podemos verificar que nenhum dos estados acima pode ser escrito como produto tensorial de estados pertencentes aos espaços de Hilbert individuais que compõem o espaço global. Por exemplo, consideremos o estado de Bell  $|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$

$$\begin{aligned} |\Psi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) = (a_1|0\rangle + b_1|1\rangle) \otimes (a_2|0\rangle + b_2|1\rangle) \\ &= a_1a_2|00\rangle + a_1b_2|01\rangle + b_1a_2|10\rangle + b_1b_2|11\rangle. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Ao escolhermos os coeficientes  $a_i$  e  $b_i$  de modo que eliminemos os estados ausentes  $|00\rangle$  e  $|11\rangle$ , essa escolha também elimina os kets  $|01\rangle$  e  $|10\rangle$ , de modo que o estado  $|\Psi^+\rangle$  não pode ser composto como um produto tensorial de estados. Situação análoga ocorre com os outros estados de Bell, evidenciando que eles não podem ser decompostos em produtos tensoriais de estados individuais.

Uma característica importante do emaranhamento é que ele decorre de uma correlação quântica intrínseca entre os sistemas que compõem o sistema global. Essa correlação quântica não possui análogo clássico e estabelece uma conexão profunda entre os estados dos sistemas envolvidos. Podemos ilustrar essa propriedade ao considerar os exemplos dos estados de Bell mencionados anteriormente.

Suponha um sistema composto por dois qubits preparado no estado emaranhado  $|\Psi^+\rangle$ . Isso pode ser realizado inicializando os qubits nos estados  $|0\rangle_1$  e  $|1\rangle_2$ , e em seguida aplicando a porta Hadamard no primeiro qubit, em sequência, aplicando porta CNOT nos dois qubits, com o qubit 1 sendo o controle.

Ao medirmos o qubit 1, a probabilidade de obtermos os valores 0 ou 1 é 50% para ambos. Digamos que o resultado seja 0, nesse caso, o segundo qubit, será necessariamente 1. Por outro lado, se o resultado for 1, então, o segundo qubit será 0. Medidas no segundo qubit vão se comportar como aleatórias e independentes, sem revelar qualquer informação sobre a medição realizada no primeiro qubit.

Mesmo que os dois qubits estejam separados por uma grande distância, mas protegidos contra dissipação e decoerência, a condição de emaranhamento se manterá e quando medirmos o primeiro qubit, saberemos imediatamente o estado do segundo qubit, ainda que eles estejam separados por muitos anos-luz de distância. Não há violação da Relatividade de Einstein, pois a informação da medida não está disponível para um observador junto ao segundo qubit. Para ele, a probabilidade de medir o segundo qubit ainda é de 50% para 0 ou 1, como se a medida no primeiro qubit não tivesse ocorrido.

Diagramas de circuitos são úteis para descrever sistemas de computação clássica, representando correntes elétricas, portas lógicas e outros componentes. Da mesma forma, esses diagramas também são úteis à computação quântica. O diagrama 2.17, por exemplo, ilustra a criação do estado emaranhado  $|\Psi^+\rangle$ .



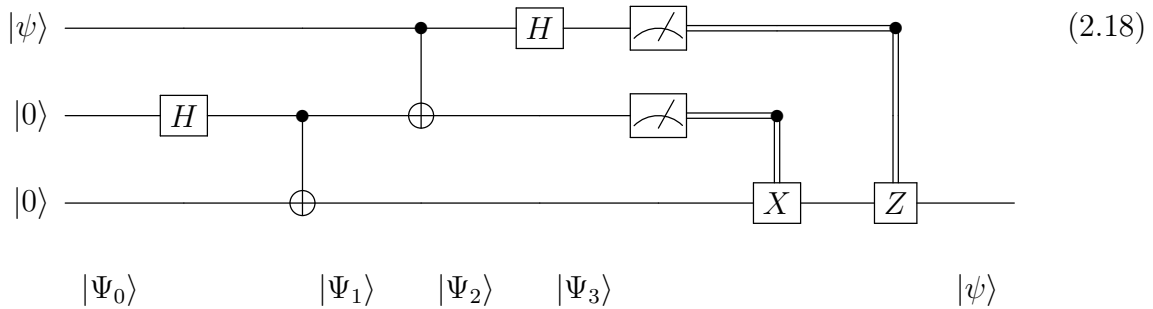
Nesse diagrama, dois qubits no estado  $|0\rangle$  compõem um sistema global que será posto em estado de emaranhamento  $|\Psi^+\rangle$ . Como o diagrama indica, o primeiro passo, é aplicar a porta  $X$  ao segundo qubit modificando o seu estado para  $|1\rangle$ . Após esta ação, o sistema total assume o estado  $|01\rangle$ . A seguir, uma porta Hadamard é aplicada ao primeiro qubit, alterando o seu estado para  $|+\rangle$ , nesse momento, o estado global torna-se  $|+\rangle|1\rangle$ . E por último, uma porta CNOT é aplicada ao sistema global, tendo o primeiro qubit como controle, resultado no estado global emaranhado  $|\Psi^+\rangle$ , um dos quatro estados de Bell. Essas seqüências de operações são completamente universais indicando que o emaranhamento é uma propriedade intrínseca dos sistemas quânticos compostos.

## 2.5 Teletransporte

Quando precisamos compartilhar nossos dados clássicos, como um arquivo de computador por exemplo, é comum oferecermos uma cópia dos bits que compõem esse arquivo. É o que Alice esperava fazer com seus qubits, a fim de compartilhar informações com Bob. No entanto, na Teoria da Informação Quântica, o princípio fundamental da Não-Clonagem estabelece a impossibilidade de se fazer cópias de estados quânticos desconhecidos. Diante desse princípio, Alice está impedida de copiar seus dados e transmiti-los para Bob. Entretanto, o protocolo de teletransporte surge como uma solução viável. Embora Alice não possa fazer cópias, ela é capaz

de enviar os dados, utilizando esse protocolo. Mas existe um preço a ser pago, os dados deixarão de existir para Alice, passando a existir exclusivamente para Bob. O Teletransporte funciona como um “Ctrl + X”, em obediência ao princípio da Não-Clonagem, a informação é perdida na origem para ficar disponível no destino.

Nessa seção vamos descrever brevemente o protocolo de Teletransporte. Inicialmente, Alice possui um qubit, cujo estado quântico é desconhecido, e deseja enviá-lo para Bob. O estado encontra-se normalizado e é representado por  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ . Além desse qubit, outros dois que foram colocados em estado de emaranhamento. Alice tem a posse de um qubit do par emaranhado, o primeiro por exemplo, enquanto Bob tem a posse do segundo. Todos os passos do protocolo estão esquematizado no diagrama 2.18. Alice aplica a porta CNOT, cujo controle é o seu qubit, no par emaranhado, e em seguida aplica a porta Hadamard no seu qubit  $|\psi\rangle$ . Então Alice realiza as medidas nos qubits em sua posse, obtendo uma das seguintes possibilidades:  $\{00, 01, 10, 11\}$ . Alice envia os bits clássicos da sua media, digamos 01, através de qualquer canal clássico, por exemplo, um sinal conduzido por fibra ótica. Com base na informação recebida, Bob deve executar a porta quântica  $X$ , se o primeiro bit for 1, em seguida, deverá aplicar a porta  $Z$  se o segundo qubit for 1. Feito tudo isso, o estado final do qubit de Bob será o estado originalmente em posse de Alice, embora continue sendo um estado desconhecido.



As equações em (2.19) resumem os resultados parciais após cada operação executada por Alice. Os estados do sistema composto pelos três qubits,  $|\Psi_i\rangle$ , estão posicionados

no diagrama 2.18 em conformidade com o momento em que foi obtido.

$$|\Psi_0\rangle = |\psi\rangle \otimes |00\rangle \quad (2.19a)$$

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= |\psi\rangle \otimes |\Phi^+\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a|000\rangle + a|011\rangle + b|100\rangle + b|111\rangle) \end{aligned} \quad (2.19b)$$

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= (U_{\text{CNOT}} \otimes \mathbb{1}) |\Psi_1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a|000\rangle + a|011\rangle + b|110\rangle + b|101\rangle) \end{aligned} \quad (2.19c)$$

$$\begin{aligned} |\Psi_3\rangle &= (H \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}) |\Psi_2\rangle \\ &= \frac{1}{2} [a(|000\rangle + |100\rangle + |011\rangle + |111\rangle) \\ &\quad + b(|010\rangle - |110\rangle + |001\rangle - |101\rangle)] \\ &= \frac{1}{2} [|00\rangle(a|0\rangle + b|1\rangle) + |01\rangle(a|1\rangle + b|0\rangle) \\ &\quad + |10\rangle(a|0\rangle - b|1\rangle) + |11\rangle(a|1\rangle - b|0\rangle)] \end{aligned} \quad (2.19d)$$

A tabela 2.1 é utilizada por Bob para aplicação de suas portas, a fim de decodificar o estado do seu qubit, com base na informação recebida de Alice. O resultado da decodificação é o estado  $|\psi\rangle$  que Alice possuía inicialmente, e agora pertence exclusivamente a Bob.

Bits de Alice	Estados de Bob	Decodificação
00	$a 0\rangle + b 1\rangle$	$\mathbb{1}$
01	$a 1\rangle + b 0\rangle$	$X$
10	$a 0\rangle - b 1\rangle$	$Z$
11	$a 1\rangle - b 0\rangle$	$ZX = iY$

**Tabela 2.1:** Portas lógicas que Bob deve aplicar em seu qubit a fim de realizar a decodificação, com base nos bits enviados por Alice.

Com isso concluímos nossa breve exposição sobre o Teletransporte Quântico, que permite mover um estado quântico desconhecido, de um local de origem para um destino, mesmo que distante. O Teletransporte ocorre em conformidade com o princípio da Não-Clonagem, e também obedece o princípio da Relatividade, ao utilizar de um canal clássico para envio de bits necessários para decodificar o estado no destino. O Teletransporte continua sendo um tópico fascinante, com intensas pesquisas, a fim de se descobrir o quão longe ele pode nos levar.

## 2.6 Portas lógicas

Portas lógicas quânticas são operações sobre qubits que promovem uma determinada alteração em seu estado quântico. Na mecânica quântica, é necessário que as portas lógicas ajam como operadores lineares que preservam a norma. Portanto, as portas quânticas lógicas são necessariamente representadas por operadores unitários. Além disso, a representação das portas lógicas através de matrizes unitárias garante também uma propriedade essencial das portas para a computação quântica, que é a reversibilidade.

A forma pela qual podemos alterar o estado de um qubit (ou de qualquer sistema quântico) é através do operador evolução. Então, por trás de cada porta quântica, existe um sistema físico interagindo com o qubit, impondo sobre um Hamiltoniano adequado, que ao agir durante um tempo controlado, evolui o qubit produzindo a transformação proposta pela porta quântica. A seguir, daremos esse enfoque às portas mais simples, como as portas NOT e Hadamard, com o objetivo de determinar o operador unitário associado com a porta.

### 2.6.1 Portas de Pauli como evolução temporal

Como exemplo simples de como é a mecânica quântica de uma porta lógica, vamos considerar como qubit um sistema de spin  $1/2$  sujeito a um campo magnético estático na direção  $\hat{n}$ . Nesse exemplo, vamos considerar uma situação ideal, na qual o qubit não tem acoplamentos com o ambiente ou esteja sujeito à outras fontes de decoerência e dissipação. Como sabemos, o spin sofre precessão em torno da direção do campo magnético. A evolução temporal do estado do qubit é governada pelo Hamiltoniano associado a esse sistema, que pode ser escrito como

$$H = \omega_0 \mathbf{S} \cdot \hat{n} \quad (2.20)$$

sendo os autovalores  $E_{\pm} = \pm \hbar \omega_0 / 2$  e  $\{|S_n; +\rangle, |S_n; -\rangle\}$  os autoestados.

Vale ressaltar que o autoestado  $|0\rangle = |\uparrow\rangle = |S_n; +\rangle$  não é o estado fundamental, mas sim o estado  $|1\rangle$ . No entanto, é comum indicar o estado fundamental como  $|0\rangle$ , para isso, basta alterar o sinal na Eq. (2.20). A consequência dessa mudança é inverter o sentido de rotação do sistema. Entretanto, não faremos tal alteração no momento.

O operador evolução temporal é dado por

$$U(t) = \exp(-iHt/\hbar) = \exp(-i\frac{\omega_0 t}{2}\sigma_n) \quad (2.21)$$

onde  $\sigma_n = \mathbf{S} \cdot \hat{n}$ . Utilizando a conhecida relação  $\exp(i\theta\sigma_n) = \cos(\theta)\mathbb{1} + i\sin(\theta)\sigma_n$ , o operador evolução fica como

$$U(t) = \cos(\frac{\omega_0 t}{2})\mathbb{1} - i\sin(\frac{\omega_0 t}{2})\sigma_n \quad (2.22)$$

Escolhendo o tempo de evolução  $t = \pi/\omega_0$ , de modo que o spin rotacione  $180^\circ$  em torno do eixo  $\hat{n}$ . O operador evolução se torna

$$U(\pi/\omega_0) = -i\sigma_n \quad (2.23)$$

O fator imaginário  $-i$  representa uma fase global e pode ser desconsiderado, de modo que o operador evolução se resume em

$$U(\pi/\omega_0) = \sigma_n \quad (2.24)$$

Considerando apenas as direções  $\hat{n} = x, y, z$  resulta nas matrizes de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Essas matrizes representam rotações de  $180^\circ$  em torno dos eixos  $x, y, z$ , respectivamente. A rotação é realizada quando o operador evolução  $U(\pi/\omega_0) = \sigma_n$  atua sobre o qubit no intervalo de tempo  $\Delta t = \pi/\omega_0$ . Portanto, um campo magnético  $B_n$  atuando durante esse intervalo de tempo proporcionará uma rotação de  $180^\circ$  em torno do eixo  $n = x, y, z$ . As matrizes de Pauli são portas lógicas de rotação em torno dos eixos  $x, y, z$ .

Para um exemplo numérico, podemos considerar um campo magnético  $B = 1\mu\text{T}$  e o raio giromagnético  $\gamma = |e|/m_e$ , onde  $e$  é a carga do elétron e  $m_e$  é a sua massa. Isso resulta em  $\omega_0 = |e|B/m_e \approx 18 \text{ kHz}$ . Portanto, um campo magnético de  $1\mu\text{T}$  na direção  $x$ , atuando por  $174\mu\text{s}$ , produzirá uma rotação de  $180^\circ$  no spin do elétron em torno do eixo  $x$ .

## 2.6.2 Porta NOT

A porta NOT, também conhecida como porta  $X$ , é uma das portas lógicas quânticas fundamentais. É uma porta de um único qubit e sua ação é inverter os kets da base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , de modo que

$$X|0\rangle = |1\rangle, \quad X|1\rangle = |0\rangle \quad (2.26)$$

Em forma matricial, a representação da porta  $X$  é dada por

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

A ação da porta NOT no estado qualquer de um qubit é:

$$X(a|0\rangle + b|1\rangle) = b|0\rangle + a|1\rangle \quad (2.28)$$

A porta NOT, ou porta matriz de Pauli  $\sigma_x$  representa uma rotação de  $180^\circ$  em torno do eixo  $x$ . Em circuitos quânticos, é indicada pelo símbolo

$$\text{---} \boxed{X} \text{---} \quad (2.29)$$

## 2.6.3 Porta Hadamard

A porta Hadamard é também uma porta fundamental, que age sobre um qubit. Ela transforma os kets da base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  numa combinação linear, tradicionalmente indicada como  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \equiv |+\rangle \quad (2.30)$$

$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \equiv |-\rangle \quad (2.31)$$

Vamos obter a forma matricial da porta Hadamard utilizando novamente a evolução temporal dada pela Eq.(2.22), como feito para as portas de Pauli. A porta Hadamard representa uma rotação de  $\pi/2$  em torno do eixo  $y$

$$U_y(\pi/2\omega_0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbb{1} - i\sigma_y) \quad (2.32)$$



Seguida por uma rotação  $\pi$  em torno de  $x$ , representada por

$$U_x(\pi/\omega_0) = \sigma_x \quad (2.33)$$

Aplicando os dois operadores evolução temporal em sequência

$$\begin{aligned} H &= U_x(\pi/\omega_0) U_y(\pi/2\omega_0) \\ &= \sigma_x \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{1} - i\sigma_y) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x - i\sigma_x\sigma_y) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x + \sigma_z) \\ H &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.34)$$

Em circuitos quânticos, a porta Hadamard é indicada pelo símbolo

$$\text{---} \boxed{H} \text{---} \quad (2.35)$$

## 2.6.4 Controlled-NOT

A porta Controlled-NOT ou apenas CNOT é uma porta de dois qubits na qual um dos qubits é designado como controle e o outro como alvo. Em geral, o qubit 1 atua como controle. A porta CNOT executa a operação NOT no qubit alvo somente quando o qubit controle encontra-se o estado  $|1\rangle$ . Se o qubit controle está no estado  $|0\rangle$ , a porta CNOT não faz nenhuma operação no qubit alvo. A porta CNOT não pode ser construída com um conjunto de rotações como as  $X$  e  $H$  e não vamos considerar a sua formação a partir de um Hamiltoniano, como feito para as outras portas. A tabela 2.2 mostra os resultados possíveis para a porta CNOT na base canônica de dois qubits.

Em circuitos quânticos, a porta CNOT é indicada pelo símbolo

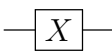
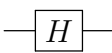
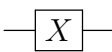
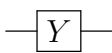
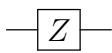

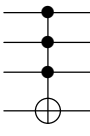


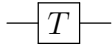
$$\begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \\ | \\ \text{---} \oplus \text{---} \end{array} \quad (2.36)$$

O símbolo  $\bullet$  indica o qubit controle e símbolo  $\oplus$  indica o qubit alvo.

Entrada	Saída
$ 00\rangle$	$ 00\rangle$
$ 01\rangle$	$ 01\rangle$
$ 10\rangle$	$ 11\rangle$
$ 11\rangle$	$ 10\rangle$

**Tabela 2.2:** Ação da porta CNOT, onde o controle é o primeiro qubit.

A tabela 2.3 apresenta uma lista de algumas portas quânticas com suas descrições e símbolos de como são representadas.

Porta	Descrição	Símbolo
NOT (ou X)	Inversão de estado	
Hadamard	Superposição de estados	
Pauli-X	Inversão na base X	
Pauli-Y	Inversão na base Y e aplicação de fase	
Pauli-Z	Inversão na base Z e aplicação de fase	
CNOT	NOT controlado por um qubit	
CCNOT (Toffoli)	NOT controlado por dois qubits	
CSWAP (Fredkin)	Troca o estado de dois qubits controlado por um terceiro qubit	
SWAP	Troca o estado de dois qubits	
T	Aplica fase de 90 graus ao estado do qubit	

**Tabela 2.3:** Lista breve de algumas portas quânticas.

Portas lógicas são componentes da computação quântica, cuja função é atuar sobre qubits a fim de promover alterações específicas em seus estados quânticos. Assim como na computação clássica, as portas lógicas quânticas são componentes essenciais,

os blocos básicos para a construção de algoritmos quânticos e processamento da informação em geral.

## 2.7 Ruídos e canais

Quando um sistema interage com o ambiente, ocorre decoerência e dissipação, resultando em uma dinâmica não unitária. No entanto, ao considerarmos um sistema em composição com o ambiente, o sistema resultante evolui com dinâmica unitária, uma vez que é um sistema isolado. Assim, o espaço de Hilbert do sistema composto pode ser representado como  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ , onde  $\mathcal{H}_S$  representa o espaço de Hilbert do sistema de interesse  $S$  e  $\mathcal{H}_E$  representa o espaço de Hilbert do ambiente  $E$ . O operador de evolução do sistema composto é dado por  $U(t) = \exp(-iHt)$ , onde  $H$  é o Hamiltoniano total do sistema. Se  $\rho(0)$  é o estado inicial composto, então, de acordo com a equação de Schrödinger,

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t). \quad (2.37)$$

O estado inicial do ambiente pode ser escrito como

$$\rho_E(0) = \sum_{\nu} \lambda_{\nu} |\nu\rangle\langle\nu|, \quad (2.38)$$

onde  $|\nu\rangle$  são os autoestados do ambiente, com seus respectivos autovalores  $\lambda_{\nu}$ .

Para obter a evolução temporal do sistema  $S$ , devemos tomar o traço parcial do sistema total, em relação ao ambiente, através da seguinte expressão:

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_E [U(t) (\rho_S(0) \otimes \rho_E(0)) U^\dagger(t)]. \quad (2.39)$$

onde  $\rho_S(0)$  representa o estado inicial do sistema  $S$ . Substituindo a Eq.(2.38), tomando o traço parcial sobre o ambiente e reorganizando, obtemos

$$\rho_S(t) = \sum_{\mu\nu} \sqrt{\lambda_{\nu}} \langle\mu|U(t)|\nu\rangle \rho_S(0) \sqrt{\lambda_{\nu}} \langle\nu|U^\dagger(t)|\mu\rangle. \quad (2.40)$$

Definindo o operador de Kraus como

$$K_{\mu\nu}(t) = \sqrt{\lambda_{\nu}} \langle\mu|U(t)|\nu\rangle. \quad (2.41)$$

A evolução temporal do sistema  $S$  pode ser expressa como

$$\rho_S(t) = \sum_{\mu\nu} K_{\mu\nu}(t) \rho_S(0) K_{\mu\nu}^\dagger(t) \quad (2.42)$$

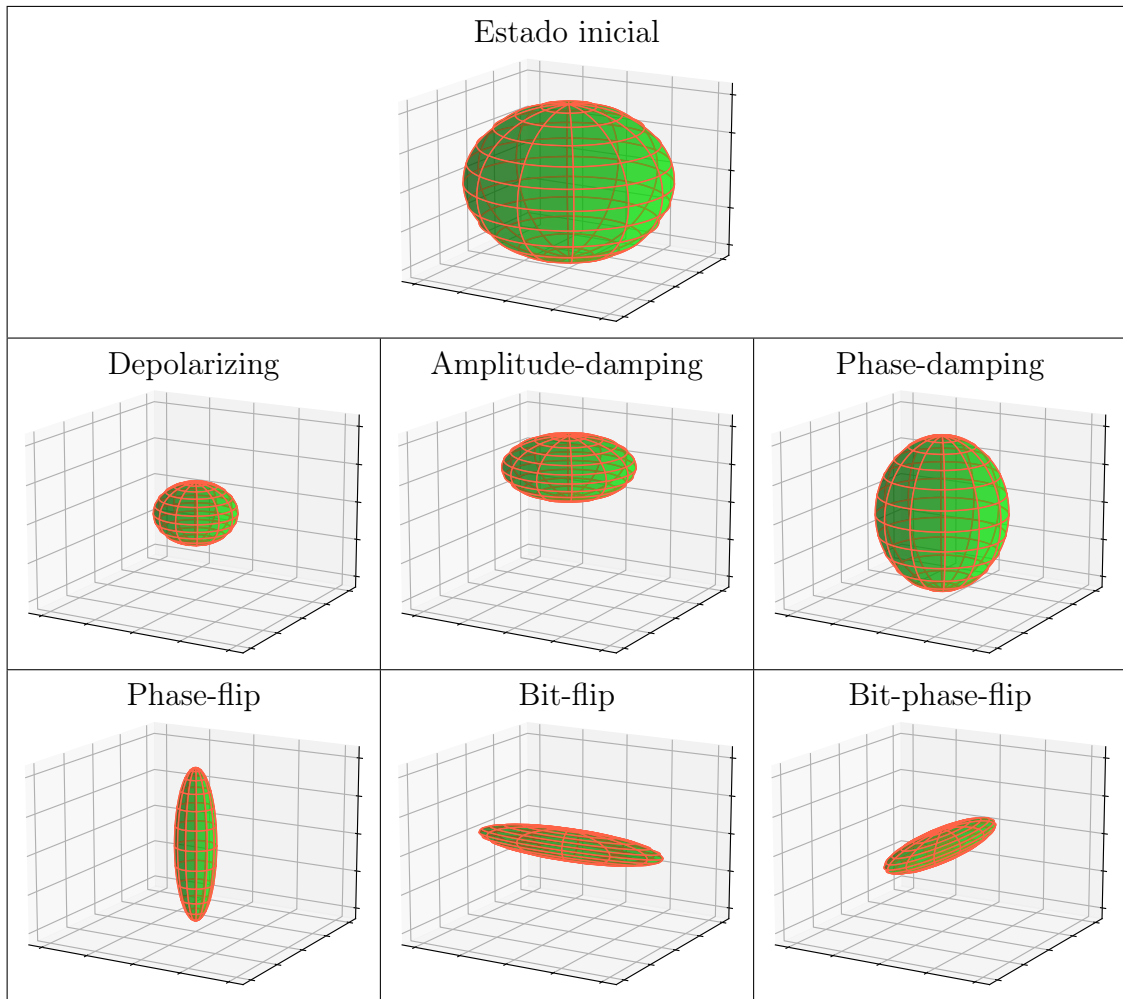
Obter os operadores de Kraus é uma tarefa complexa que depende do modelo de ambiente e das interações envolvidas. No entanto, na literatura, existem alguns canais padrão de ruído para os quais os operadores de Kraus são conhecidos. Alguns exemplos são

1. Depolarizing:  $K_1 = \sqrt{1-3p/4} \mathbb{1}$ ,  $K_2 = \sqrt{p/4} \sigma_x$ ,  $K_3 = \sqrt{p/4} \sigma_y$ ,  $K_4 = \sqrt{p/4} \sigma_z$ ,
2. Amplitude-damping:  $K_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{bmatrix}$ ,  $K_2 = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{p} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$
3. Phase-damping ou dephasing:  $K_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{bmatrix}$ ,  $K_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{p} \end{bmatrix}$
4. Phase-flip:  $K_1 = \sqrt{p} \mathbb{1}$ ,  $K_2 = \sqrt{1-p} \sigma_z$
5. Bit-flip:  $K_1 = \sqrt{p} \mathbb{1}$ ,  $K_2 = \sqrt{1-p} \sigma_x$
6. Bit-phase-flip:  $K_1 = \sqrt{p} \mathbb{1}$ ,  $K_2 = \sqrt{1-p} \sigma_y$

Esses operadores podem ser encontrados, por exemplo na referência [3]. O parâmetro  $p$  representa a probabilidade de ocorrência em relação ao efeito desejado. A tabela 2.4 mostram figuras indicando os efeitos de vários canais sobre a esfera de Bloch, vista com um conjunto de estados iniciais para o sistema  $S$ .

É interessante mencionar que a Eq.(2.5) foi usada na construção desses gráficos. Nessa equação,  $\rho$  foi substituído pelo estado quântico resultante da aplicação dos operadores de Kraus ao estado inicial  $\rho_0(\theta, \varphi)$ . A equação é utilizada para obter as coordenadas  $(x, y, z)$  que representam o estado modificado  $\rho$ , e esse processo é feito sobre uma grade  $(\theta, \varphi)$  na esfera de Bloch.

Os efeitos dos ruídos na esfera de Bloch são auto-descritivos através de seus gráficos, por exemplo: O canal depolarize age igualmente em todos os estados, diminuindo a pureza desses estados de forma igualitária, ou seja reduzindo igualmente o raio da esfera de Bloch, fazendo com que ela se concentre cada vez mais próxima do centro



**Tabela 2.4:** Efeitos de canais de ruído na esfera de Bloch, com  $p = 0.6$ .

da esfera. No canal amplitude-damping, a ação é assimétrica levando a dissipação da energia ao longo do eixo  $z$ . Isto provoca o achatamento da esfera na direção desse eixo.

## 2.8 Equação de Lindblad

A mecânica quântica trata inicialmente com sistemas não dissipativos, governados pela equação de Schrödinger. Nessas formulações, os sistemas são considerados como fechados e não interagem com o ambiente. No entanto, uma abordagem mais realista leva em consideração a interação do sistema com o ambiente, introduzindo assim o fenômeno da dissipação.

Ao modelar a interação com o ambiente, podemos considerar o sistema mais ambiente

como um sistema isolado, permitindo assim recuperar a evolução unitária. Na matriz densidade do sistema total, efetuamos o traço parcial em relação ao ambiente, obtendo assim a evolução temporal do sistema. O resultado desse procedimento é a equação de Lindblad [27], dada por

$$\dot{\rho}(t) = -i[H(t), \rho(t)] + \sum_i \gamma_i \left( L_i \rho(t) L_i^\dagger - \frac{1}{2} \{L_i^\dagger L_i, \rho(t)\} \right) \quad (2.43)$$

Nesta equação,  $H(t)$  representa o Hamiltoniano do sistema, enquanto  $\gamma_i$  e  $L_i$  denotam as taxas de dissipação e os operadores de Lindblad, respectivamente, as chaves representam o anticomutador, por exemplo  $\{A, B\} = AB + BA$ . Essa formulação reflete as interações do sistema com seu ambiente, no limite Markoviano, modelando os efeitos da dissipação.

## 2.9 Cálculo variacional

O cálculo variacional é uma ferramenta matemática fundamental para estudar sistemas dinâmicos sujeitos a princípios de máximo ou mínimo, como o princípio de Hamilton na Mecânica Analítica. Sua importância se estende à resolução de problemas de otimização e controle em computação quântica, que é o nosso interesse e pelo que vamos fazer uma breve exposição.

Ele se baseia no conceito de funcional[28, 29], que é análogo ao conceito de função. De forma simples, enquanto uma função  $f$  associa uma variável  $x$  a um número  $f(x)$ , um funcional  $F$  associa uma função  $f(x)$  a um número indicado como  $F[f(x)]$ . Exemplos clássicos de funcionais são integrais definidas, produtos internos de funções, ação do princípio de Hamilton, entre outros.

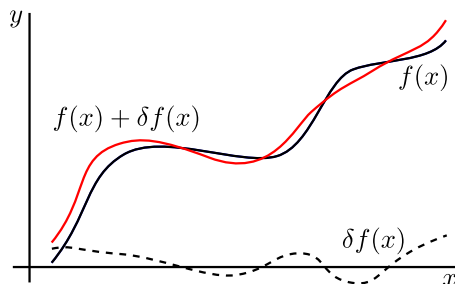
Para uma função  $f(\mathbf{x})$ , os pontos de máximo e mínimo ou inflexão são comumente referidos como pontos de extremo. Ao passar do ponto  $\mathbf{x}$  para  $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$ , a função  $f(\mathbf{x})$  sofre uma variação  $df = f(\mathbf{x} + d\mathbf{x}) - f(\mathbf{x})$ . Podemos expressar essa variação utilizando a série de Taylor. Considerando apenas os termos de primeira ordem, temos:

$$df = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i \quad (2.44)$$

A condição  $df = 0$  nos permite encontrar os pontos de extremos da função  $f(\mathbf{x})$ , uma vez que, sendo as variações  $dx_i$  independentes, essa condição implica diretamente em

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = 0 \quad (2.45)$$

No contexto dos funcionais, a variação é indicada como  $\delta F$ , e ocorre devido a uma variação infinitesimal e arbitrária na função  $f(x)$ , designada como  $\delta f(x)$ . A figura 2.2 ilustra esses componentes do cálculo variacional.



**Figura 2.2:** Função base  $f(x)$  (linha preta), uma escolha arbitrária de variação infinitesimal  $\delta f(x)$  e a função variada  $f(x) + \delta f(x)$  (linha vermelha).

Inicialmente podemos indicar a variação funcional por

$$\delta F = \frac{\delta F}{\delta f(x)} \delta f(x) \quad (2.46)$$

Porém, devemos levar em conta todas as contribuições em cada valor de  $x$ , o que é feito por meio da integral

$$\delta F = \int \left( \frac{\delta F}{\delta f(x)} \right) \delta f(x) dx \quad (2.47)$$

Se o funcional depender de funções de duas variáveis  $f(x, t)$ , então

$$\delta F = \iint \left( \frac{\delta F}{\delta f(x, t)} \right) \delta f(x, t) dx dt \quad (2.48)$$

Por outro lado

$$\delta F[f(x)] = F[f(x) + \delta f(x)] - F[f(x)] \quad (2.49)$$

Desenvolvendo a integral gerada pela equação acima, até que ela se reduza na forma indicada pela Eq.(2.47) (ou (2.48)), poderemos identificar a derivada funcional. Fazendo as variações  $\delta f(x)$  de forma arbitrária e independente, a condição de extremo  $\delta F = 0$  implica diretamente em

$$\frac{\delta F}{\delta f(x)} = 0 \quad (2.50)$$

**Exemplo 1** Vamos ilustrar o cálculo da derivada funcional para um funcional de interesse no controle ótimo. Considere o funcional definido através da seguinte expressão

$$J[\psi] = \langle \psi(T) | O | \psi(T) \rangle \quad (2.51)$$

onde  $O$  é um operador hermitiano, e o funcional  $J$  é o valor esperado de  $O$  no instante  $T$ . Por brevidade, vamos indicar kets dependentes do tempo  $|\psi(t)\rangle, |\varphi(t)\rangle$  apenas como  $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$

$$J[\psi] = \int_0^T dt \langle \psi | O | \psi \rangle \delta(t - T) \quad (2.52)$$

$$J[\psi + \delta\psi] = \int_0^T dt \langle \psi + \delta\psi | O | \psi + \delta\psi \rangle \delta(t - T) \quad (2.53)$$

$$= \int_0^T dt (\langle \psi | O | \psi \rangle + \langle \psi | O | \delta\psi \rangle + \langle \delta\psi | O | \psi \rangle + \langle \delta\psi | O | \delta\psi \rangle) \delta(t - T) \quad (2.54)$$

Ao considerar a variação do funcional  $J[\psi + \delta\psi]$ , é necessário focar nos termos onde os  $\delta\psi$  ocorrem em “kets”, por exemplo,  $\langle \psi | O | \delta\psi \rangle$ . Termos como  $\langle \delta\psi | O | \psi \rangle$ , com  $\delta\psi$  no “bra”, estão associados com  $\delta\psi^*$  que são nulos quando estamos calculando  $J[\psi + \delta\psi]$ .



Considerando apenas os termos com  $|\delta\psi\rangle$ , temos que

$$J[\psi + \delta\psi] = \int_0^T dt (\langle\psi|O|\psi\rangle + \langle\psi|O|\delta\psi\rangle) \delta(t - T) \quad (2.55)$$

$$= J[\psi] + \int_0^T dt \langle\psi|O|\delta\psi\rangle \delta(t - T) \quad (2.56)$$

$$J[\psi + \delta\psi] - J[\psi] = \int_0^T dt \langle\psi|O|\delta\psi\rangle \delta(t - T) \quad (2.57)$$

$$\delta J = \int_0^T dt \langle\psi|O|\delta\psi\rangle \delta(t - T) \quad (2.58)$$

$$\delta J = \int_0^T dt \langle O\psi|\delta\psi\rangle \delta(t - T) \quad (2.59)$$

$$\delta J = \int_0^T dt \langle O\psi \delta(t - T)|\delta\psi\rangle \quad (2.60)$$

Como o  $\delta\psi$  está independente, na integral, podemos concluir que a derivada funcional é dada por

$$\frac{\delta J}{\delta\psi(\mathbf{r}, t)} = \left( O\psi(\mathbf{r}, t) \delta(t - T) \right)^* \quad (2.61)$$

**Exemplo 2** Um outro funcional de interesse em controle quântico, pode ser escrito como  $J[\psi] = -2 \text{Im} \int_0^T dt \langle\chi(t)|L(t)|\psi(t)\rangle$ , onde o operador  $L(t) = i\partial_t - H(t)$ , sendo  $H(t)$  o Hamiltoniano.

Para encontrarmos a variação nesse caso, temos que efetuar os seguintes passos

$$J[\psi] = -2 \text{Im} \int_0^T dt \langle\chi|L|\psi\rangle \quad (2.62)$$

$$= -2 \int_0^T dt \frac{\langle\chi|L|\psi\rangle - \langle\psi|L^\dagger|\chi\rangle}{2i} \quad (2.63)$$

$$J[\psi] = i \int_0^T dt (\langle\chi|L|\psi\rangle - \langle\psi|L^\dagger|\chi\rangle) \quad (2.64)$$

$$J[\psi + \delta\psi] = i \int_0^T dt (\langle\chi|L|\psi + \delta\psi\rangle - \langle\psi + \delta\psi|L^\dagger|\chi\rangle) \quad (2.65)$$

$$= i \int_0^T dt (\langle\chi|L|\psi\rangle + \langle\chi|L|\delta\psi\rangle - \langle\psi|L^\dagger|\chi\rangle - \langle\delta\psi|L^\dagger|\chi\rangle) \quad (2.66)$$

Pela mesma razão, explicada no exemplo 1, termos com  $\langle\delta\psi|$  não contribuem para a

variação  $J[\psi + \delta\psi] - J[\psi]$ , focando apenas nos termos com  $|\delta\psi\rangle$ , temos que

$$J[\psi + \delta\psi] = i \int_0^T dt \left( \langle \chi | L | \psi \rangle + \langle \chi | L | \delta\psi \rangle - \langle \psi | L^\dagger | \chi \rangle \right) \quad (2.67)$$

$$= i \int_0^T dt \left( \langle \chi | L | \psi \rangle - \langle \psi | L^\dagger | \chi \rangle \right) + i \int_0^T dt \langle \chi | L | \delta\psi \rangle \quad (2.68)$$

$$= J[\psi] + i \int_0^T dt \langle \chi | L | \delta\psi \rangle \quad (2.69)$$

$$J[\psi + \delta\psi] - J[\psi] = i \int_0^T dt \langle \chi | L | \delta\psi \rangle \quad (2.70)$$

$$\delta J = i \int_0^T dt \langle \chi | L | \delta\psi \rangle \quad (2.71)$$

Voltando com  $L = i\partial_t - H$

$$\delta J = i \int_0^T dt \langle \chi | i\partial_t - H | \delta\psi \rangle \quad (2.72)$$

$$= i \int_0^T dt \left( \langle \chi | i\partial_t | \delta\psi \rangle - \langle H\chi | \delta\psi \rangle \right) \quad (2.73)$$

Queremos transferir o operador  $i\partial_t$  para dentro do bra, assim como fizemos com  $H$ . Essa ação deve ser realizada aplicando a regra do produto de derivadas, adaptada para o produto interno na notação de Dirac. Esse procedimento foi mostrado no apêndice (A.9) e aqui será aplicado para  $i\partial_t$ , ou seja

$$\langle \chi | i\partial_t | \delta\psi \rangle = i\partial_t \langle \chi | \delta\psi \rangle + \langle i\partial_t \chi | \delta\psi \rangle \quad (2.74)$$

substituindo na Eq. (2.73) e integrando o primeiro termo

$$\int_0^T dt \langle \chi | i\partial_t | \delta\psi \rangle = i \langle \chi | \delta\psi \rangle \Big|_0^T + \int_0^T dt \left( \langle i\partial_t \chi | \delta\psi \rangle - \langle H\chi | \delta\psi \rangle \right) \quad (2.75)$$

$$= i \langle \chi | \delta\psi \rangle \Big|_0^T + \int_0^T dt \langle (i\partial_t - H)\chi | \delta\psi \rangle \quad (2.76)$$

$$= i \langle \chi(T) | \delta\psi(T) \rangle + \int_0^T dt \langle (i\partial_t - H)\chi | \delta\psi \rangle \quad (2.77)$$

$$i \int_0^T dt \langle \chi | i\partial_t | \delta\psi \rangle = -\langle \chi(T) | \delta\psi(T) \rangle + i \int_0^T dt \langle (i\partial_t - H)\chi | \delta\psi \rangle \quad (2.78)$$

Em  $T = 0$ , o sistema sempre assume o mesmo estado inicial, logo  $|\delta\psi\rangle$ , em  $T = 0$ ,

deve ser nulo, o que leva a  $\langle \chi(0) | \delta\psi(0) \rangle = 0$ .

$$\delta J = -\langle \chi(T) | \delta\psi(T) \rangle + i \int_0^T dt \langle (i\partial_t - H)\chi | \delta\psi \rangle \quad (2.79)$$

$$\delta J = -\langle \chi(T) | \delta\psi(T) \rangle + \int_0^T dt \langle -iL | \delta\psi \rangle \quad (2.80)$$

É necessário que a integral esteja na forma da Eq. (2.48), a fim de reconhecermos a derivada  $\delta J / \delta\psi$ , por isso, devemos retornar o primeiro termo do segundo membro para uma integral no tempo, fazemos isso com o auxílio da função  $\delta(t - T)$ , o que resulta em

$$\delta J = \int_0^T dt [-\langle \chi | \delta\psi \rangle \delta(t - T) + \langle -iL | \delta\psi \rangle] \quad (2.81)$$

$$\delta J = \int_0^T dt \langle (-\delta(t - T) - iL)\chi | \delta\psi \rangle \quad (2.82)$$

Com  $|\delta\psi\rangle$  isolado, podemos obter a derivada funcional

$$\frac{\delta J}{\delta\psi} = [(-\delta(t - T) - iL)\chi]^* \quad (2.83)$$

$$\frac{\delta J}{\delta\bar{\psi}} = -\chi^* \delta(t - T) - i(i\partial_t + H)\chi^* \quad (2.84)$$

## 2.10 Controle quântico ótimo

O controle quântico ótimo é uma área da teoria quântica que busca guiar sistemas quânticos para atingir metas específicas, como otimizar o desempenho ou executar tarefas especializadas. Nesta seção, vamos apresentar de modo informal os principais passos envolvidos no controle quântico ótimo.

Consideremos um sistema quântico com Hamiltoniano problema  $H_0$ , e hamiltonianos controles  $\varepsilon_j(t)H_j$ . A combinação desses hamiltonianos resulta num hamiltoniano dependente do tempo dado por

$$H(t) = H_0 + \sum_j \varepsilon_j(t)H_j \quad (2.85)$$

O objetivo do controle é conduzir o sistema a partir de um estado inicial  $|\psi_0\rangle$  até o estado final  $O|\psi\rangle$ , onde  $O$  é uma operação unitária. Esse controle é realizado ao longo do intervalo de tempo  $T$  durante a evolução do sistema.

No controle quântico ótimo, utilizamos os princípios do cálculo variacional para guiar a evolução do sistema. Para isso, definimos um funcional que avalia a proximidade entre a evolução do sistema durante o intervalo de tempo  $T$  e o estado alvo desejado. Podemos construir esse funcional com base em três quantidades.

A primeira expressão para a fidelidade é uma que permite medir a proximidade entre o estado evoluído  $|\psi(T)\rangle$  e o estado alvo  $|\psi_{\text{alvo}}\rangle$ . Chamaremos essa parte do funcional de  $J_1[\psi]$ , que é calculada pela expressão:

$$J_1[\psi] = \langle \psi(T) | O | \psi(T) \rangle \quad (2.86)$$

Em termos de controle do sistema para alcançar um determinado alvo, o operador  $O$  pode ser definido como  $O = |\psi_{\text{alvo}}\rangle\langle\psi_{\text{alvo}}|$ .

A segunda parte do funcional é um termo de penalização, que tem o objetivo de desestimular amplitudes muito intensas no campo de controle ou desvios significativos em relação à estimativa inicial  $\varepsilon^{(0)}(t)$  do controle. Denotaremos esse termo como  $J_2[\varepsilon]$ , definido por:

$$J_2[\varepsilon] = - \sum_k \int_0^T dt \alpha_k \varepsilon_k^2(t) \quad (2.87)$$

Nessa expressão, o valor  $\alpha_j$  controla a força da penalização. O sinal negativo é para reduzir a fidelidade obtida  $J_1$ , desse modo cumprindo a função de penalidade.

A terceira parte do funcional é um termo relacionado com o vínculo da equação Schrödinger, que garante a coerência da evolução do sistema com essa equação. Esse funcional pode ser definido da seguinte forma

$$J_3[\psi, \chi, \varepsilon] = -2 \operatorname{Im} \int_0^T \langle \chi(t) | i\partial_t - H(t) | \psi(t) \rangle dt, \quad (2.88)$$

onde  $\chi(t)$  é um coestado adjunto do sistema.

O funcional de controle quântico ótimo completo é obtido pela soma das três partes discutidas anteriormente:

$$J[\chi, \psi, \varepsilon] = J_1[\psi] + J_2[\varepsilon] + J_3[\chi, \psi, \varepsilon] \quad (2.89)$$

A variação de  $J[\chi, \psi, \varepsilon]$  é a soma de todas essas variações

$$\delta J[\chi, \psi, \varepsilon] = \delta J_1[\psi] + \delta J_2[\varepsilon] + \delta J_3[\chi, \psi, \varepsilon] \quad (2.90)$$

$$\delta J[\chi, \psi, \varepsilon] = \int_0^T dt \int d^3r \left( \frac{\delta J_1}{\delta \psi} \delta \psi + \sum_k \frac{\delta J_2}{\delta \varepsilon_k} \delta \varepsilon_k + \frac{\delta J_3}{\delta \psi} \delta \psi + \frac{\delta J_3}{\delta \chi} \delta \chi + \sum_k \frac{\delta J_3}{\delta \varepsilon_k} \delta \varepsilon_k \right) \quad (2.91)$$

$$\delta J[\chi, \psi, \varepsilon] = \int_0^T dt \int d^3r \left[ \frac{\delta J_3}{\delta \chi} \delta \chi + \left( \frac{\delta J_1}{\delta \psi} + \frac{\delta J_3}{\delta \psi} \right) \delta \psi + \sum_k \left( \frac{\delta J_2}{\delta \varepsilon_k} + \frac{\delta J_3}{\delta \varepsilon_k} \right) \delta \varepsilon_k \right] \quad (2.92)$$

Nos exemplos 1 e 2 (pág. 39) realizamos uma descrição detalhada de como calcular derivadas funcionais. Neste ponto, em vez de fazer todos os cálculos, apresentaremos diretamente os resultados obtidos ao executar passos análogos aos exemplos citados, os resultados são

$$\frac{\delta J_1}{\delta \psi} = O\psi^* \delta(T-t) \quad (2.93)$$

$$\frac{\delta J_2}{\delta \varepsilon_k} = -2\alpha_k \varepsilon_k \quad (2.94)$$

$$\frac{\delta J_3}{\delta \chi} = i(i\partial_t + H)\psi^* \quad (2.95)$$

$$\frac{\delta J_3}{\delta \psi} = -\chi^* \delta(T-t) - i(i\partial_t + H)\chi^* \quad (2.96)$$

$$\frac{\delta J_3}{\delta \varepsilon_k} = -2 \operatorname{Im} \langle \chi | H_k | \psi \rangle \quad (2.97)$$

O funcional  $J[\chi, \psi, \varepsilon]$  será um extremo quando  $\delta J[\chi, \psi, \varepsilon] = 0$ . Com base na Eq.(2.92), essa condição é alcançada, quando

$$\frac{\delta J_3}{\delta \chi} = 0 \quad (2.98)$$

$$\frac{\delta J_1}{\delta \psi} + \frac{\delta J_3}{\delta \psi} = 0 \quad (2.99)$$

$$\sum_k \frac{\delta J_2}{\delta \varepsilon_k} + \frac{\delta J_3}{\delta \varepsilon_k} = 0 \quad (2.100)$$

Substituindo as derivadas funcionais, teremos as equações do controle do sistema, que são

$$i(i\partial_t + H)\psi^* = 0 \quad (2.101)$$

$$O\psi^* \delta(T-t) - \chi^* \delta(T-t) - i(i\partial_t + H)\chi^* = 0 \quad (2.102)$$

$$-2\alpha_k \varepsilon_k - 2 \operatorname{Im} \langle \chi | H_k | \psi \rangle = 0 \quad (2.103)$$

Tomando o conjugado complexo da Eq. (2.101) obtemos a equação de Schrödinger

para evolução do estado  $|\psi\rangle$

$$(i\partial_t - H(t))\psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.104)$$

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \psi_0(\mathbf{r}) \quad (2.105)$$

A equação (2.102) é um pouco mais sutil devido a função delta estar presente. Inicialmente vamos tomar o complexo conjugado e reagrupar os termos

$$(i\partial_t - H)\chi = i(\chi - O\psi)\delta(T - t) \quad (2.106)$$

A seguir, vamos impor que a função  $\chi(\mathbf{r}, t)$  seja contínua em  $t = T$ . Para ver como isso afeta a equação, consideremos a seguinte integral

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} \int_{T-\xi}^{T+\xi} dt (i\partial_t - H)\chi = \lim_{\xi \rightarrow 0} \int_{T-\xi}^{T+\xi} dt i(\chi - O\psi)\delta(T - t) \quad (2.107)$$

A primeira integral é igual a zero porque se trata da integração de uma função contínua em um intervalo infinitesimal. O resultado da segunda integral é  $\chi(\mathbf{r}, T) - O\psi(\mathbf{r}, T)$ , que, por ser igual ao valor nulo da primeira integral, resulta na condição  $\chi(\mathbf{r}, T) = O\psi(\mathbf{r}, T)$ . Portanto, a Eq. (2.107) se torna em duas equações

$$(i\partial_t - H(t))\chi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.108)$$

$$\chi(\mathbf{r}, T) = O\psi(\mathbf{r}, T)$$

Esse desdobramento é interessante, pois impõe uma condição final em uma equação diferencial, em vez de uma condição inicial, como de costume. Isso sugere que a função  $\chi(\mathbf{r}, t)$  pode ser interpretada como evoluindo em modo reverso no tempo. Ou seja, em cada instante  $t$ , precisamos obter a função (coestado)  $\chi(\mathbf{r}, t)$ , que ao evoluir no intervalo  $[t, T]$ , atinge o estado  $O\psi(\mathbf{r}, T)$ .

Considerando a evolução reversa e a exigência de continuidade para  $\chi$ , a equação (2.102) resulta em

$$(i\partial_t + H(t))\chi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.109)$$

$$\chi(\mathbf{r}, T) = O\psi(\mathbf{r}, T)$$

E por fim, a terceira equação de controle, Eq.(2.103) nos permite obter os campos que modulam os hamiltonianos de controle

$$\alpha_k \varepsilon_k(t) = -\text{Im} \langle \chi(t) | H_k | \psi(t) \rangle \quad (2.110)$$

Resumindo, as equações de controle do sistema são

$$(i\partial_t - H(t))\psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \psi(\mathbf{r}, 0) = \psi_0(\mathbf{r}) \quad (2.111)$$

$$(i\partial_t + H(t))\chi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \chi(\mathbf{r}, T) = O\psi(\mathbf{r}, T) \quad (2.112)$$

$$\alpha_k \varepsilon_k(t) = -\text{Im} \langle \chi(t) | H_k | \psi(t) \rangle \quad (2.113)$$

Na terceira equação, é conveniente redefinir  $\varepsilon_j$  como  $\varepsilon_j - \varepsilon_j^{(0)}$ , onde  $\varepsilon_j^{(0)}$  é uma função referência, geralmente uma estimativa inicial para o controle. Além disso, é comum o uso de uma função envelope  $S(t)$  com a finalidade de suavizar a entrada e saída do controle no intervalo de otimização. Tudo isso resulta em

$$\varepsilon_k(t) = \varepsilon_k^{(0)}(t) - \frac{S(t)}{\alpha_k} \text{Im} \langle \chi(t) | H_k | \psi(t) \rangle \quad (2.114)$$

### 2.10.1 Caso dissipativo

As equações de controle obtidas até agora aplicam-se a sistemas sem dissipação. Para generalizá-las para o caso com dissipação, são necessárias algumas alterações. Por exemplo, a representação do estado do sistema muda de um vetor de estado  $|\psi(t)\rangle$  para uma matriz densidade  $\rho(t)$ . Isso nos leva à evolução do estado, que agora é regida pela equação mestra de Lindblad

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}(\rho) \quad (2.115)$$

onde o superoperador  $\mathcal{L}(\rho) = -i[H, \rho] + D[\rho]$ , com  $-i[H, \rho]$  representando a parte unitária, e  $D$  a dissipação, sendo

$$D[\rho] = \sum_j \gamma_j \left( L_j \rho L_j^\dagger - \frac{1}{2} \{L_j^\dagger L_j, \rho\} \right) \quad (2.116)$$

$\gamma_j$  é a taxa de decaimento,  $L_j$  são operadores de Lindblad e  $\{, \}$  o anticomutador.

A matriz densidade correspondente ao coestado  $\chi(\mathbf{r}, t)$  será designada por  $\sigma(t)$ , e sua evolução reversa obedece a equação

$$\dot{\sigma} = -i[H, \sigma] - D^\dagger(\sigma) \quad (2.117)$$

Comparado as equações de Schrödinger

$$\dot{\psi} = -iH\psi \quad (2.118)$$

e de Lindblad

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}(\rho) \quad (2.119)$$

podemos observar que a substituição de  $H$  por  $i\mathcal{L}$  torna equação de Schrödinger semelhante a equação de Lindblad, o que nos permite aproveitar os resultados da equação de Schrödinger na equação de Lindblad. Além disso, é necessário trocar o produto escalar pelo produto Hilbert-Schmidt. Aplicando essa abordagem na equação de correção de campo, temos os seguintes passos

$$\begin{aligned} \alpha_k \varepsilon_k &= -\text{Im} \langle \chi | H_k | \psi \rangle \\ H_k &= \frac{\partial H}{\partial \varepsilon_k} \rightarrow \frac{\partial i\mathcal{L}}{\partial \varepsilon_k} = [H_k, \cdot] \\ \langle \chi | H_k | \psi \rangle &\rightarrow \text{Tr}(\sigma [H_k, \rho]) \end{aligned} \quad (2.120)$$

Resumindo, as equações de controle para o caso dissipativo são

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + D(\rho), \quad \rho(0) = |\psi_0\rangle\langle\psi_0| \quad (2.121)$$

$$\dot{\sigma} = -i[H, \sigma] - D^\dagger(\sigma), \quad \sigma(T) = O|\psi(T)\rangle\langle\psi(T)|O^\dagger \quad (2.122)$$

$$\alpha_k \varepsilon_k(t) = -\text{Im} \text{Tr}(\sigma [H_k, \rho]) \quad (2.123)$$

## 2.10.2 Implementação do Krotov

Para implementar o algoritmo de Krotov, podemos seguir os passos descritos abaixo.

- (I) Definimos uma grade  $\{t_0, t_1, \dots, t_{N+1}\}$ , para o intervalo  $[0, T]$  de evolução do sistema, de forma que este fique dividido em  $N$  partes iguais. Na grade,  $t_0 = 0$  e  $t_{N+1} = T$ .
- (II) Os controles  $\varepsilon_k(\tilde{t}_j)$ ,  $k = 1, 2, \dots, M$ , são considerados constantes dentro do intervalo  $[t_{j-1}, t_j]$ , onde  $j$  varia de 1 a  $N + 1$ . Cada valor de controle está associado a um instante de tempo  $\tilde{t}_j$  que corresponde ao ponto médio do intervalo  $[t_{j-1}, t_j]$ .
- (III) Seja  $(i)$  a iteração corrente; utilizamos os controles  $\varepsilon_k^{(i-1)}(\tilde{t}_j)$  para evoluir o estado  $\psi$  no intervalo  $[t_{j-1}, t_j]$ , onde  $j = 1, 2, \dots, N + 1$ . Após essa etapa, teremos obtido todos os estados do sistema  $\psi^{(i-1)}(t_0), \psi^{(i-1)}(t_1), \dots, \psi^{(i-1)}(t_{N+1})$ ,



que devem ser mantidos na memória durante essa iteração. Se  $(i)$  for a primeira iteração, então  $(i - 1)$  se refere à condição inicial do sistema, bem como à estimativa inicial dos controles.

- (IV) Com (III) obtemos o estado inicial  $\chi^{(i)}(T) = O\psi^{(i-1)}(t_{N+1})$  que será propagado para trás. Antes de cada propagação reversa, devemos atualizar os controles de acordo com a expressão

$$\varepsilon_k^{(i)}(\tilde{t}_j) = \varepsilon_k^{(i-1)}(\tilde{t}_j) - \frac{S(\tilde{t}_j)}{\alpha_k} \text{Im} \langle \chi^{(i)}(t_j) | H_k | \psi^{(i-1)}(t_j) \rangle \quad (2.124)$$

Com o controle  $\varepsilon_k^{(i)}(\tilde{t}_j)$ , obtemos o estado  $\chi^{(i)}(t_{j-1})$ . Continuamos o processo até chegarmos em  $\chi^{(i)}(t_0)$ . Isso encerra a iteração  $(i)$ .

- (V) Se a precisão desejada for alcançada em (IV), o processo termina. Caso contrário, retornamos ao passo (III), e a iteração  $(i)$  se torna  $(i - 1)$ . Ao concluir as iterações, os dados da otimização são retornados, por exemplo, um vetor de controles otimizados  $[\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_M]$ , onde  $\varepsilon_k$  tem dimensão  $N \times 1$ . Também é útil definir uma função passada como parâmetro, a fim de que seja executada ao terminar cada iteração. Isso permite calcular, por exemplo, observáveis de nosso interesse e acompanhar sua evolução nas iterações.

As etapas acima tratam o caso de sistemas com evolução unitária. Para sistemas com dissipação, isto é, as etapas são as mesmas, porém precisamos considerar as adaptações propostas na seção 2.10.1.

Os cálculos indicados nessa seção e realizados ao longo da tese, foram conduzidos utilizando uma combinação de linguagens de programação. A implementação dos modelos foram realizadas principalmente em Julia[30] por ser uma linguagem de alto desempenho e flexibilidade, e em Fortran[31], um sistema também de alto desempenho.

## Capítulo 3

# Teoria de controle ótimo aplicada à computação quântica adiabática considerando sistemas fechados

### 3.1 Introdução

A computação quântica é atualmente uma das áreas mais proeminentes da Física devido à sua possibilidade de provocar uma mudança revolucionária nas tecnologias atuais [32–34]. No entanto, em vez de computadores quânticos em larga escala, temos à nossa disposição os dispositivos quânticos chamados de Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ), que já podem, em princípio, superar o poder dos computadores clássicos [35]. Na era atual dos NISQ, em contraste com a computação quântica padrão baseada em um conjunto de portas lógicas, novos paradigmas computacionais têm surgido com base na evolução de Hamiltonianos cuidadosamente projetados. Por exemplo, algoritmos quânticos variacionais podem lidar com uma variedade de problemas, como determinação de estados fundamentais em química, aprendizado de máquina e otimização combinatória [36–41].

Neste contexto de novos paradigmas de computação quântica, há os algoritmos quânticos adiabáticos (AQAs), que utilizam uma combinação apropriada de Hamiltonianos independentes do tempo para realizar a computação [23, 24]. AQAs exploram o teorema adiabático, que afirma que um sistema quântico permanece em seu estado fundamental instantâneo se a evolução temporal for suficientemente lenta. Dentro dessa abordagem, o Hamiltoniano total muda adiabaticamente do Hamiltoniano

inicial para o Hamiltoniano do problema e o estado fundamental final é a solução do problema computacional. No entanto, o tempo necessário para manter a condição adiabática pode ser muito longo, o que pode inviabilizar situações práticas. Várias alternativas foram propostas para contornar esse problema, como a evolução adiabática local ou o uso de termos contra-diabáticos [42, 43]. A nossa contribuição para esse caso justamente está na utilização da teoria de controle quântico para encontrar uma evolução temporal otimizada, capaz de realizar as tarefas necessárias em uma escala de tempo bem menor do que a necessária para se conseguir realizar a evolução adiabática.

Os tradicionais algoritmos quânticos variacionais (VQAs) também são baseados em um Hamiltoniano dependente do tempo parametrizado adequadamente, que é aplicado a um registro de qubits [44, 45]. No tempo final da evolução, o registro devidamente manipulado conterá a solução do problema. VQAs são utilizados para resolver problemas específicos variando um conjunto de parâmetros do Hamiltoniano total, que também parametriza a evolução. Como um caso especial de VQAs, os algoritmos quânticos aproximados de otimização (QAOAs) foram desenvolvidos para resolver problemas de otimização combinatória [46]. O QAOA consiste na aplicação de uma sequência dos Hamiltonianos de controle e do problema em alternância, onde os parâmetros variacionais correspondem aos tempos de aplicação desses operadores unitários. Nesse caso, os Hamiltonianos são independentes do tempo e a solução da tarefa computacional se dá através da determinação dos tempos em que cada Hamiltoniano fica ligado/desligado que minimiza o valor médio do Hamiltoniano do problema no tempo final.

Recentemente, vários trabalhos têm explorado as conexões entre a teoria do controle ótimo e os VQAs e também com o QA [47–50]. Em um estudo anterior [51], argumentou-se que, para um tempo fixo, controles de pulso quadrado (tipo bang-bang) são ótimos, o que apoia a metodologia QAOA. No entanto, a partir da forma padrão de QA que envolve uma única função de controle, um estudo mais recente [52] mostrou que uma forma mais geral de solução ótima é do tipo “bang-annealing-bang”, o que significa que um controle híbrido de tempo variável, começando com o valor mínimo permitido e terminando com o valor máximo possível, com um segmento de suavização intermediário, geralmente é ótimo.

Neste capítulo, analisamos esse problema no contexto da Teoria do Controle Ótimo. A evolução do sistema é governada por uma combinação de um Hamiltoniano de controle e um Hamiltoniano do problema, cada um modulado por uma função de controle independente. A utilização de duas funções de controle independentes será o diferencial do nosso trabalho em relação ao trabalho anterior [52], onde

somente uma função de controle foi analisada. Usamos também as funções de controle limitadas, ou seja, será imposto um vínculo nas funções de tal forma que essas não ultrapassem certas amplitudes máximas e mínimas. Além disso, faremos a comparação das soluções resultantes do controle quântico com as obtidas pelo método QAOA. Para controles limitados, encontramos dois regimes dependentes do tempo total de evolução: (i) para tempos suficientemente longos, existem soluções ótimas em que o estado alvo do estado fundamental pode ser obtido exatamente; (ii) para tempos curtos, as soluções ótimas não conseguem preparar completamente o estado alvo. Determinamos também o tempo mínimo, o qual pode ser definido pelo menor tempo total de evolução para o qual o estado alvo pode ser preparado exatamente. Se os gradientes do Hamiltoniano de controle associado, em relação aos controles (funções de comutação), são positivos e o tempo final de evolução é menor que o tempo mínimo, demonstramos que a solução ótima é obtida simplesmente definindo ambas as funções de controle em seus valores máximos durante toda a evolução. Chamamos esse tipo de solução de “double-bang”.

Interessantemente, a computação quântica universal pode ser alcançada através do protocolo de teletransporte de portas adiabáticas (AGT, na sigla em inglês) [25]. Portanto, iremos utilizar esse protocolo de teletransporte como teste para os métodos de otimização mencionados acima. Através da solução de “double-bang”, mostraremos que é possível implementar a computação quântica universal por meio do AGT da forma mais rápida possível. Em outras palavras, a computação quântica universal pode, em princípio, ser realizada ligando os Hamiltonianos de controle e do problema do esquema AGT. Em particular, o tempo mínimo para o AGT é o tempo em que o valor médio do Hamiltoniano do problema atinge seu estado fundamental com a solução de “double-bang”; assim, realizando a tarefa computacional com praticamente total precisão.

## 3.2 O problema de controle

Considere que são dados dois Hamiltonianos independentes do tempo:  $H_0$  (de controle) e  $H_1$  (de problema), com  $|\phi_0\rangle$  sendo o estado fundamental de  $H_0$ , com autovalor  $E_0^0$ , e  $|\chi_0\rangle$  sendo o estado fundamental de  $H_1$ , com autovalor  $E_0^1$ . Suponha que o sistema esteja inicialmente preparado no estado fundamental de  $H_0$ ,  $|\psi(t=0)\rangle = |\phi_0\rangle$ , e evolua de acordo com o Hamiltoniano total dependente do tempo,

$$H(t) = \varepsilon_0(t)H_0 + \varepsilon_1(t)H_1, \quad (3.1)$$

onde  $\varepsilon_0(t)$  e  $\varepsilon_1(t)$  são duas funções de controle independentes.

Buscamos encontrar as funções de controle  $\varepsilon_0^*(t)$  e  $\varepsilon_1^*(t)$  que maximizem o valor esperado de um dado observável  $O$  no tempo final  $t = T$ , expresso como um funcional das funções de controle,

$$J[\varepsilon_0, \varepsilon_1] = \langle O(T) \rangle \equiv \langle \psi(T) | O | \psi(T) \rangle, \quad (3.2)$$

enquanto limitamos as amplitudes das funções de controle a  $0 \leq \varepsilon_k \leq 1$ ,  $k = 0, 1$ . O valor máximo possível de  $J$  é dado pelo maior autovalor de  $O$ , que designamos simplesmente por  $J_{\max}$ .

Nós destacamos que nas versões padrão de computação adiabática/annealing, os controles  $\varepsilon_k$  não são independentes, sendo relacionados entre si por  $\varepsilon_1(t) = 1 - \varepsilon_0(t)$ . O observável é o negativo do Hamiltoniano do problema,  $O = -H_1$  (ou equivalentemente, o problema pode ser reformulado como a minimização de  $H_1$ ). Além disso, pelo teorema adiabático, é conhecido que uma solução ótima para o problema de controle existe para tempos finais  $T$  suficientemente longos, nos quais o valor máximo de  $J_{\max}$  pode ser obtido.

As condições necessárias para soluções ótimas para o problema de controle podem ser obtidas por meio do cálculo de variações [53], conforme apresentado no capítulo 2, Princípios e Conceitos. Alternativamente, no espírito da formulação de Pontryagin, também é possível obter essas condições necessárias usando a chamada função Hamiltoniana de controle, que pode ser obtida por uma transformação de Legendre a partir do formalismo variacional (ver Ref.[52, 54] para mais detalhes). Assim, por conveniência, consideramos o problema em termos do Hamiltoniano de controle  $\mathcal{H}$  (não confundir com Hamiltoniano do sistema  $H(t)$ ) dado por [7, 55].

$$\mathcal{H}(\psi, \lambda, \varepsilon_0, \varepsilon_1, t) = -i \langle \lambda(t) | H(t) | \psi(t) \rangle + c.c., \quad (3.3)$$

onde  $|\lambda(t)\rangle$  é um vetor estado adjunto auxiliar. Doravante, adotamos  $\hbar = 1$ .

Substituindo a Eq.(3.1) na Eq. (3.3), obtemos,

$$\mathcal{H}(\psi, \lambda, \varepsilon_0, \varepsilon_1, t) = \varepsilon_0(t) \Phi_0(t) + \varepsilon_1(t) \Phi_1(t), \quad (3.4)$$

onde os gradientes em relação aos controles (também chamados de funções de comutação) são definidos como:

$$\Phi_k(t) \equiv 2 \operatorname{Im} \{ \langle \lambda(t) | H_k | \psi(t) \rangle \}, \quad k = 0, 1. \quad (3.5)$$

De acordo com o princípio do máximo de Pontryagin, as condições necessárias para

uma solução ótima são dadas pela evolução dos vetores de estado e adjuntos,

$$|\dot{\psi}(t)\rangle = -iH(t)|\psi(t)\rangle, \quad |\psi(0)\rangle = |\phi_0\rangle, \quad (3.6a)$$

$$|\dot{\lambda}(t)\rangle = -iH(t)|\lambda(t)\rangle, \quad |\lambda(T)\rangle = O|\psi(T)\rangle, \quad (3.6b)$$

juntamente com a condição máxima do Hamiltoniano de controle,

$$\mathcal{H}(\psi^*, \lambda^*, \varepsilon_0^*, \varepsilon_1^*, t) \geq \mathcal{H}(\psi^*, \lambda^*, \varepsilon_0, \varepsilon_1, t), \quad (3.7)$$

$$\forall \text{ admissible } \varepsilon_0, \varepsilon_1,$$

onde o símbolo  $*$  se refere às quantidades dinâmicas calculadas em uma solução ótima.

Considerando variações admissíveis  $\delta\varepsilon_k$  em torno da solução ótima,  $\varepsilon_k(t) = \varepsilon_k^*(t) + \delta\varepsilon_k(t)$ , Eq. (3.7) resulta em,

$$\frac{\partial\mathcal{H}(\varepsilon_k^*)}{\partial\varepsilon_k} \delta\varepsilon_k(t) = \Phi_k^*(t) \delta\varepsilon_k(t) \leq 0, \quad k = 0, 1. \quad (3.8)$$

Embora a Eq.(3.8) possa ser vista como uma forma mais fraca do princípio de Pontryagin do que a Eq.(3.7), ela também fornece condições necessárias para otimalidade. Assim, para cada valor de  $k$  e para um dado  $t$ , três situações podem ocorrer: (i)  $\Phi_k^*(t) = 0$ , (ii)  $\Phi_k^*(t) > 0$  e  $\delta\varepsilon_k(t) < 0$ , ou (iii)  $\Phi_k^*(t) < 0$  e  $\delta\varepsilon_k(t) > 0$ . Note que  $\delta\varepsilon_k(t) < 0$  para todas as variações admissíveis implica em  $\varepsilon_k^*(t) = 1$ , porque as variações em torno do valor máximo devem ser negativas, enquanto  $\delta\varepsilon_k(t) > 0$  implica em  $\varepsilon_k^*(t) = 0$ , porque as variações em torno do mínimo devem ser positivas. Como é usual na Teoria de Controle Ótimo [53], um intervalo singular ocorre quando os gradientes se anulam simultaneamente em um intervalo finito de tempo,  $\Phi_0^*(t) = \Phi_1^*(t) = 0$ . Como explicado abaixo, assumiremos tacitamente a seguir que intervalos singulares não ocorrem considerando tempos finais suficientemente curtos.

É direto verificar que  $\varepsilon_0(t)\dot{\Phi}_0 = -\varepsilon_1(t)\dot{\Phi}_1$ , e como consequência, a derivada temporal do Hamiltoniano de controle é dada por,

$$\frac{d\mathcal{H}(t)}{dt} = \dot{\varepsilon}_0(t)\Phi_0 + \dot{\varepsilon}_1(t)\Phi_1. \quad (3.9)$$

Para soluções ótimas, ou o controle é constante,  $\dot{\varepsilon}_k^*(t) = 0$ , ou o gradiente se anula,  $\Phi_k^*(t) = 0$ , o que implica que o Hamiltoniano de controle calculado em uma trajetória ótima  $\mathcal{H}^*$  é uma constante do movimento. Além disso, quando as amplitudes dos controles ótimos estão dentro dos limites  $0 < \varepsilon_k^*(t) < 1$ , para todo  $t \in [0, T]$ , a situação é similar ao problema de controle irrestrito: necessariamente os gradientes se anulam e o Hamiltoniano de controle se anula identicamente,  $\mathcal{H}^* = 0$ .

As condições necessárias para uma solução ótima evidenciam que quando o tempo final  $T$  é suficientemente longo, existem soluções ótimas em que o Hamiltoniano de controle  $\mathcal{H}^*$  é nulo e o valor máximo possível do funcional Eq. (3.2),  $J_{\max}$ , pode ser alcançado. Por outro lado, abaixo de um certo valor mínimo  $T_{\min}$  do tempo de evolução,  $J_{\max}$  não pode ser alcançado. Nesse caso,  $T < T_{\min}$ , o Hamiltoniano de controle na solução ótima é uma constante positiva.

Para mostrar isso, seguindo o raciocínio do artigo de referência [52], considere que o tempo final  $T$  do problema de controle é livre e defina um novo funcional de custo  $J'$  dada por:

$$J'[\varepsilon_0, \varepsilon_1, T] = J[\varepsilon_0, \varepsilon_1] - \alpha T, \quad (3.10)$$

onde  $\alpha \geq 0$  é uma constante positiva dada. O funcional de custo a ser maximizado,  $J'$ , possui um termo de penalidade para considerar o aumento do tempo final. Podemos associar o mesmo Hamiltoniano de controle da Eq.(3.4) a esse funcional de custo com tempo final livre, juntamente com as equações(3.6) e (3.7), e a condição adicional necessária,

$$\mathcal{H}^*(T) = \alpha. \quad (3.11)$$

Para  $\alpha = 0$ , correspondendo a um tempo final livre sem termo de penalidade, o Hamiltoniano de controle calculado em uma solução ótima se anula para todos os tempos e  $J^*$  assume seu valor máximo possível  $J^* = J_{\max}$ . Nesse caso, haverá um tempo final suficientemente longo para que possamos encontrar soluções ótimas em que os controles estejam dentro dos limites. No entanto, para  $\alpha \neq 0$ , o Hamiltoniano de controle em uma solução ótima é uma constante positiva  $\alpha$  e  $J_{\max}$  não é obtido. Uma análise detalhada desses resultados foi apresentada recentemente no artigo de referência [7].

Retomando o problema com um tempo final fixo, consideremos o caso em que  $T < T_{\min}$ , o que significa que os gradientes  $\Phi_k(t)$  não se anulam simultaneamente e  $\mathcal{H}^*(T) = \text{constante} > 0$ . Note que o valor do Hamiltoniano de controle em uma solução ótima depende exclusivamente do tempo final  $T$ . Agora, definindo  $O = -H_1$ , temos  $J^*(T) < -E_0^1 = J_{\max}$ . Além disso, a partir das equações (3.6a – 3.6b) e (3.5), obtemos:

$$\begin{aligned} \Phi_1^*(T) &= 2 \operatorname{Im} \{ \langle \lambda^*(T) | H_1 | \psi^*(T) \rangle \} = \\ &= -2 \operatorname{Im} \{ \langle \psi^*(T) | H_1^2 | \psi^*(T) \rangle \} = 0 \end{aligned} \quad (3.12)$$

e

$$\begin{aligned}
\Phi_0^*(0) &= 2 \operatorname{Im} \{ \langle \lambda^*(0) | H_0 | \psi^*(0) \rangle \} \\
&= 2E_0^0 \operatorname{Im} \{ \langle \lambda^*(0) | \psi^*(0) \rangle \} \\
&= -2E_0^0 \operatorname{Im} \{ \langle \psi^*(T) | H_1 | \psi^*(T) \rangle \} = 0,
\end{aligned} \tag{3.13}$$

onde usamos o fato de  $\frac{d}{dt} \langle \lambda^*(t) | \psi^*(t) \rangle = 0$ .

Assim, concluimos que

$$\mathcal{H}^*(T) = \varepsilon_0^*(T) \Phi_0^*(T) = \varepsilon_1^*(0) \Phi_1^*(0). \tag{3.14}$$

Além disso, como  $\mathcal{H}^*(T)$  é positivo,  $\Phi_0^*(T) > 0$  e  $\Phi_1^*(0) > 0$ . Conseqüentemente, de (3.8), devemos ter  $\varepsilon_0^*(T) = \varepsilon_1^*(0) = 1$  e  $\mathcal{H}^*(T) = \Phi_0^*(T) = \Phi_1^*(0)$ . Notamos que, diferentemente do caso do controle único [52], o fato de  $\varepsilon_0^*(T) = 1$  e  $\varepsilon_1^*(0) = 1$  não impõe nenhuma condição em  $\varepsilon_0^*(0)$  e  $\varepsilon_1^*(T)$ .

O conjunto de condições necessárias deduzidas até agora ajuda a identificar candidatos a soluções ótimas. Aqui, selecionamos um candidato, que chamamos de solução “double-bang”, consistindo em ambos os controles sendo definidos com seus valores máximos ( $\varepsilon_0(t) = \varepsilon_1(t) = 1$ ) para todo  $t \in [0, T]$ . Claramente, essa solução satisfaz a condição de contorno recém-deduzida,  $\varepsilon_0(T) = 1$  e  $\varepsilon_1(0) = 1$ . Além disso, assumindo que ambos os gradientes são positivos para  $\varepsilon_0(t) = \varepsilon_1(t) = 1$ , então a solução “double-bang” também satisfaz a Eq. (3.8). Adicionalmente, o Hamiltoniano de controle é dado por  $\mathcal{H}(T) = \Phi_0(t) + \Phi_1(t)$ . Observando que a derivada temporal da soma dos gradientes pode ser escrita como  $\frac{d}{dt} [\Phi_0(t) + \Phi_1(t)] = [\varepsilon_0(t) - \varepsilon_1(t)] \xi(t)$ , onde  $\xi(t) = 2 \operatorname{Re} \{ \langle \lambda(t) | [H_1, H_0] | \psi(t) \rangle \}$ , percebemos que o Hamiltoniano de controle é constante para a solução “double-bang”. As condições para os gradientes serem não negativos são específicas do problema, uma vez que dependem essencialmente dos Hamiltonianos  $H_0$  e  $H_1$ . No entanto, mostraremos a seguir que os gradientes são não negativos para um protocolo de teletransporte, e conseqüentemente a solução “double-bang” é ótima até o tempo mínimo, permitindo a computação quântica universal.

É interessante comparar o resultado obtido com duas funções de controle com o esquema de QA padrão, que utiliza uma única função de controle tal que  $\varepsilon_1(t) = 1 - \varepsilon_0(t)$ , para o mesmo tempo final  $T$ . Em particular, se uma solução ótima para o caso de dois controles é dada pela solução “double-bang”, então, a partir da Eq. (3.7), uma solução ótima para o caso de um único controle é, em geral, uma solução



sub-ótima para o caso de dois controles.

### 3.3 Método de otimização TBQCP

No presente estudo, os controles ótimos são buscados pelo paradigma de controle quântico de dois pontos de fronteira (TBQCP)[56], que adaptamos para limitar as amplitudes das funções de controle e também pode ser relacionado ao cálculo das variações. A técnica do TBQCP tem sido empregada para estudar protocolos relacionados à computação quântica com grande eficiência, por exemplo, para calcular controles ótimos capazes de implementar o conjunto universal de portas quânticas em pontos quânticos duplos[57] ou o algoritmo de permutação em qubits híbridos [58].

O TBQCP é um método iterativo monotônico capaz de encontrar controles ótimos que, dado um estado inicial  $|\psi(t=0)\rangle \equiv |\psi_0\rangle$ , maximizam o valor esperado de um observável físico  $O$  no tempo final  $T$ . Começando com controles iniciais, o observável físico é evoluído retroativamente (do tempo final  $t = T$  até o tempo inicial  $t = 0$ ) através da seguinte equação

$$i\frac{\partial O^{(n)}(t)}{\partial t} = [O^{(n)}(t), H^{(n)}(t)], \quad O(T) \rightarrow O(0), \quad (3.15)$$

onde  $H^{(n)}(t) = \sum_{k=0}^1 \varepsilon_k^{(n)}(t)H_k$  e  $\varepsilon_k^{(n)}(t)$  são os controles na  $n$ -ésima iteração. O estado inicial  $|\psi_0\rangle$  é evoluído para frente com a equação de Schrödinger,

$$i\frac{\partial |\psi^{(n+1)}(t)\rangle}{\partial t} = H^{(n+1)}(t)|\psi^{(n+1)}(t)\rangle, \quad (3.16)$$

onde  $H^{(n+1)}(t) = \sum_{k=0}^1 \varepsilon_k^{(n+1)}(t)H_k$  e  $\varepsilon_k^{(n+1)}(t)$  é o controle da  $(n+1)$ -ésima iteração para  $k = 0, 1$ , que é calculado através da seguinte expressão

$$\varepsilon_k^{(n+1)}(t) = \varepsilon_k^{(n)}(t) + \eta f_k^{(n+1)}(t), \quad k = 0, 1, \quad (3.17)$$

onde  $\eta$  é uma constante positiva e a correção do controle é dada por

$$f_k^{(n+1)}(t) = 2\text{Im} \{ \langle \psi^{(n+1)}(t) | O^{(n)}(t) H_k | \psi^{(n+1)}(t) \rangle \}, \quad (3.18)$$

onde  $k = 0, 1$ . Foi demonstrado que, à medida que uma solução ótima é aproximada, a correção do controle  $f_k^{(n+1)}(t)$  é equivalente ao gradiente  $\Phi_k(t)$  (Eq.(3.5)[56]), estabelecendo uma conexão próxima entre o TBQCP e a versão variacional da teoria de controle ótimo. As equações (3.15 – 3.17) são resolvidas de forma autoconsistente,

começando com controles iniciais de tentativa  $\varepsilon_k^{(0)}(t)$  ( $k = 0, 1$ ) e aumentando monotonamente o valor do observável físico desejado  $\langle O(T) \rangle = \langle \psi(T) | O(T) | \psi(T) \rangle$ , veja mais detalhes em Ref. [56]. Além disso, em cada etapa de iteração, as amplitudes dos controles são limitadas ao intervalo  $[0, 1]$  ao se impor o valor do limite correspondente sempre que a função de controle ultrapassa os limites do intervalo  $[0, 1]$  na Eq.(3.17). Nesse caso, se a função de controle  $\varepsilon_k^{(0)}(t)$  ( $k = 0, 1$ ) ultrapassar um dos limites 0 ou 1 em um determinado intervalo de tempo, seu valor é definido como igual ao limite cruzado nesse mesmo intervalo de tempo durante todo o cálculo autoconsistente.

### 3.4 Algoritmo de Otimização Aproximada Quântica (QAOA)

Para fazer uma comparação com as soluções otimizadas do problema de controle, também consideramos a abordagem do Algoritmo de Otimização Aproximada Quântica (QAOA). No espírito das Variações Quânticas Adiabáticas (VQAs), o ansatz do QAOA consiste em alternar a ativação de cada Hamiltoniano  $H_k$  ( $k = 0, 1$ ) em um determinado intervalo de tempo, enquanto o outro é desativado. Assim, a evolução temporal é dada por:

$$|\psi(t)\rangle = U(H_0, \beta_p)U(H_1, \gamma_p) \dots U(H_0, \beta_1)U(H_1, \gamma_1)|\psi(0)\rangle, \quad (3.19)$$

onde  $U(H_0, \beta_j) = \exp(-iH_0\beta_j)$  e  $U(H_1, \gamma_j) = \exp(-iH_1\gamma_j)$  são os operadores de evolução temporal.  $\beta_j$  e  $\gamma_j$  são parâmetros variacionais reais e positivos que devem ser ajustados para maximizar o valor esperado de um observável  $O$  no tempo final  $t = T$ , ou seja,  $\langle O(T) \rangle$ . Os parâmetros variacionais são restritos de tal forma que  $T = \sum_{j=1}^p (\gamma_j + \beta_j)$ , onde  $p$  especifica o número de mudanças de um Hamiltoniano para outro. Por construção, o QAOA oferece uma solução para o problema de controle, de modo que os controles satisfazem  $\varepsilon_1(t) = 1 - \varepsilon_0(t)$  e  $\varepsilon_0(t)$  como o “bang-bang”, o que significa que o controle é ligado e desligado (possivelmente várias vezes) durante a evolução. Utilizamos a otimização por enxame de partículas (PSO, do inglês Particle Swarm Optimization) para encontrar o conjunto de parâmetros  $\gamma_j, \beta_j$  para valores fixos de  $p$  [59, 60]. No mesmo espírito de Ref.[52], o QAOA será utilizado como uma referência para verificar a eficiência de outras abordagens.

### 3.5 Protocolo de Teletransporte

Nós consideramos o protocolo de teletransporte introduzido na Ref. [25]. Neste protocolo, há três qubits sob a ação do Hamiltoniano (3.1), onde o Hamiltoniano de controle é dado por

$$H_0 = -\omega_0 (\sigma_x^2 \sigma_x^3 + \sigma_z^2 \sigma_z^3), \quad (3.20)$$

cujos estados fundamentais são duplamente degenerados,  $|\phi_0^{(1)}\rangle = |0\rangle \otimes |\Phi\rangle$  e  $|\phi_0^{(2)}\rangle = |1\rangle \otimes |\Phi\rangle$ , onde  $|\Phi\rangle$  é um estado de Bell,  $|\Phi\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$ , e  $\sigma_m^j$  é a matriz de Pauli que atua na direção  $m$  do  $j$ -ésimo qubit.

O Hamiltoniano do problema é dado por

$$H_1 = -\omega_0 (\sigma_x^1 \sigma_x^2 + \sigma_z^1 \sigma_z^2), \quad (3.21)$$

cujos estados fundamentais são também duas vezes degenerados,  $|\chi_0^{(1)}\rangle = |\Phi\rangle \otimes |0\rangle$  e  $|\chi_0^{(2)}\rangle = |\Phi\rangle \otimes |1\rangle$ . Este protocolo tem como objetivo teletransportar a informação inicialmente codificada no primeiro qubit para o terceiro qubit no tempo final de evolução, o que é equivalente a uma porta swap. A fidelidade no tempo final de evolução  $T$  pode ser avaliada através de

$$F(T) = |\langle \psi(T) | \chi_0 \rangle|^2, \quad (3.22)$$

onde  $|\chi_0\rangle$  pode ser escolhido como qualquer combinação linear dos estados  $|\chi_0^1\rangle$  e  $|\chi_0^2\rangle$  sem perda de generalidade [25]. Como já discutido em Ref. [25], portas de um qubit podem ser obtidas pela transformação unitária do Hamiltoniano de controle  $H'_0 = U_G H_0 U_G^\dagger$ , onde  $U_G$  é a porta de um qubit atuando no terceiro qubit, que pode ser obtida por campos magnéticos locais. A mesma ideia pode ser generalizada para implementar portas de dois qubits. Nesse caso, o Hamiltoniano deve ser estendido para um conjunto de seis qubits, pois cada subconjunto de três qubits é necessário para trocar informações entre o primeiro e o terceiro qubit. Da mesma forma que as portas de um qubit, as portas de dois qubits são alcançadas por transformações unitárias do Hamiltoniano de controle. Por exemplo, a porta controlled-not (CNOT) pode ser realizada pelo Hamiltoniano de controle rotacionado da seguinte forma:

$$H'_0 = -\omega_0 U_{\text{CNOT}} (\sigma_x^2 \sigma_x^3 + \sigma_z^2 \sigma_z^3 + \sigma_x^5 \sigma_x^6 + \sigma_z^5 \sigma_z^6) U_{\text{CNOT}}, \quad (3.23)$$

onde  $U_{\text{CNOT}}$  é a porta controlled-not aplicado entre o terceiro e sexto qubits. O Hamiltoniano do problema não depende da porta de dois qubits, assim

$$H_1 = -\omega_0 (\sigma_x^1 \sigma_x^2 + \sigma_z^1 \sigma_z^2 + \sigma_x^4 \sigma_x^5 + \sigma_z^4 \sigma_z^5). \quad (3.24)$$

Ao definir o estado fundamental de (3.23) como o estado inicial, o estado evoluído no tempo até o tempo mínimo  $T_{\min}$ , sob o Hamiltoniano total  $H = H'_0 + H_1$ , é exatamente dado por  $|\psi(T_{\min})\rangle = U_{\text{CNOT}}|\chi_0\rangle$ . A porta unitária relacionada ao controlled-not pode ser obtida evoluindo o Hamiltoniano  $H_{\text{CNOT}} = \Delta(\sigma_x^3 + \sigma_z^6) + \Gamma\sigma_x^3\sigma_z^6$ , com  $\Delta$  e  $\Gamma$  sendo proporcionais aos campos magnéticos locais e à interação entre o terceiro e sexto qubits, respectivamente. A porta unitária é simplesmente  $U_{\text{CNOT}} = \exp(-iH_{\text{CNOT}}T_{\min})$ . Além disso, o Hamiltoniano  $H_{\text{CNOT}}$  pode ser transformado em uma interação do tipo ZZ, que é experimentalmente alcançável, aplicando uma rotação de  $\pi/4$  na direção y ao terceiro qubit, assim

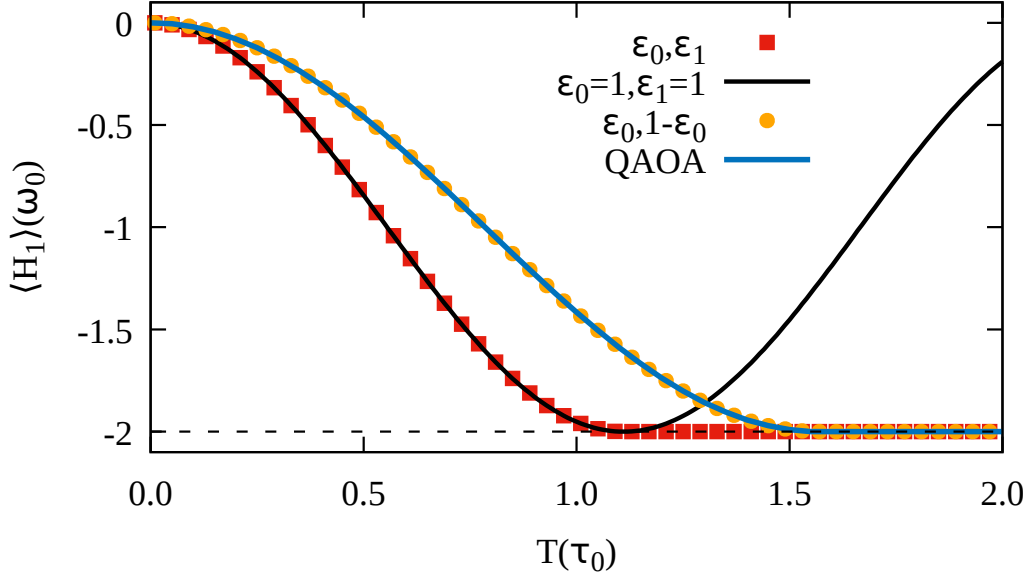
$$H_{\text{CNOT}}^R = \Delta(\sigma_z^3 + \sigma_z^6) + J\sigma_z^3\sigma_z^6, \quad (3.25)$$

O sobrescrito  $R$  indica que o Hamiltoniano está expresso em uma base que foi rotacionada em  $\pi/4$  na direção y.

## 3.6 Resultados numéricos

Para avaliar e comparar diferentes abordagens, implementamos o protocolo de teletransporte usando os seguintes esquemas de evolução temporal: (1<sup>o</sup>) a otimização de dois controles  $\varepsilon_0(t)$  e  $\varepsilon_1(t)$ ; (2<sup>o</sup>) a solução de “double-bang”  $\varepsilon_0(t) = \varepsilon_1(t) = 1$ ; (3<sup>o</sup>) a otimização de um único controle, ou seja,  $\varepsilon_1(t) = 1 - \varepsilon_0(t)$ ; e (4<sup>o</sup>) a abordagem QAOA; (5<sup>o</sup>) A evolução adiabática linear (LAE), onde  $\varepsilon_0(t) = 1 - t/T$  e  $\varepsilon_1(t) = t/T$ , sendo também usada para inicializar o método TBQCP, conforme equações (3.15 – 3.17).

Na figura 3.1, comparamos o valor médio  $\langle H_1(T) \rangle = \langle \psi(T) | H_1 | \psi(T) \rangle$  como uma função do tempo final  $T$ , considerando diferentes esquemas de evolução temporal, onde  $|\psi(T)\rangle$  é a função de onda evoluída até o tempo final pelo Hamiltoniano definido na Eq. (3.1). O valor mínimo de  $\langle H_1(T) \rangle$  é alcançado em um tempo mais curto para a otimização de dois controles e para a solução “double-bang”, como mostrado na figura 3.1. Nesse caso, o valor médio  $\langle H_1 \rangle(T)$  atinge seu mínimo de  $-2\omega_0$  para o tempo final  $T = 1.11\tau_0$ , onde  $\tau_0 = \omega_0^{-1}$  é a escala de tempo adotada. A abordagem QAOA e a otimização de um único controle têm desempenho essencialmente igual e alcançam o valor mínimo para tempos finais acima de  $T = 1.57\tau_0$ . Como demonstrado na seção 3.2, quando o tempo final  $T \leq T_{\min}$ , a solução ótima é a solução “double-bang”. Para esse tipo de solução, o valor médio pode ser avaliado analiticamente como  $\langle H_1(T) \rangle = -\omega_0 (1 - \cos(2\sqrt{2}\omega_0 T))$ , o que fornece o tempo mínimo  $T_{\min} = \frac{\pi}{2\sqrt{2}}\tau_0$ . Assim, o valor médio  $\langle H_1(T) \rangle$  para a solução double-bang e a otimização de dois controles coincide até  $T_{\min}$ . Embora o resultado analítico para  $\langle H_1(T) \rangle$  tenha sido obtido usando a porta de swap, esse resultado não muda quando uma porta de um ou

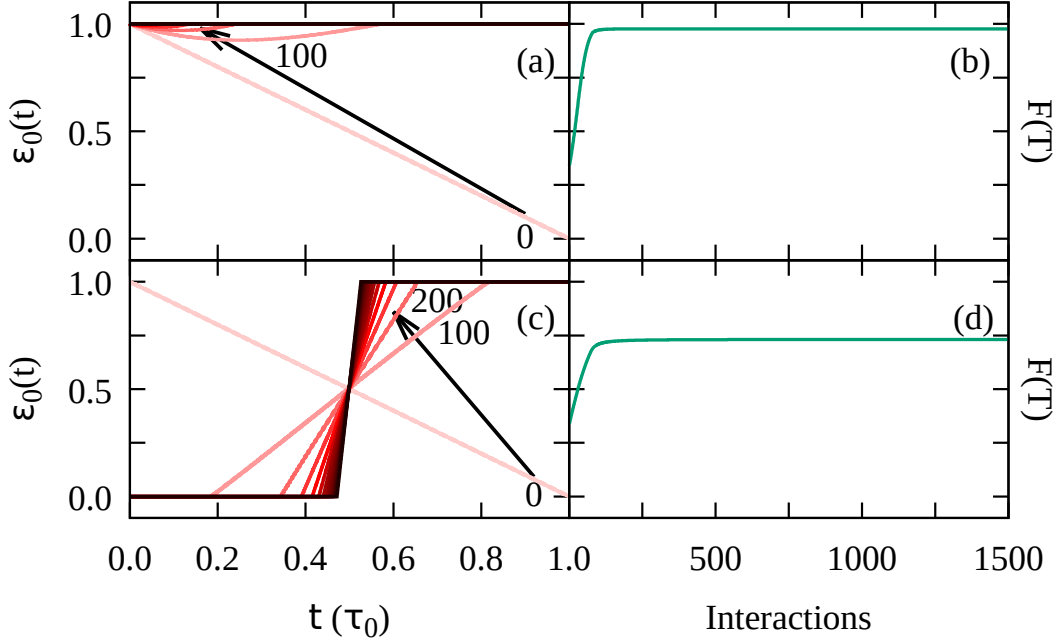


**Figura 3.1:** Valor médio  $\langle H_1(T) \rangle$  como uma função do tempo final de evolução, usando o primeiro esquema (curva vermelha pontilhada), o segundo esquema (curva preta sólida), o terceiro esquema (curva laranja pontilhada) e o quarto esquema (curva azul sólida) de evolução temporal. A curva preta tracejada indica o menor autovalor de  $H_1$ .

dois qubits é aplicada aos qubits físicos. Esse resultado é muito interessante porque fornece uma receita simples para construir um computador quântico universal, que pode ser resumida da seguinte forma: (i) implementar as interações dos Hamiltonianos equações(3.20) e (3.21) ou equações(3.23) e (3.24); (ii) construir a transformação unitária  $U_G$  ou CNOT usando campos magnéticos locais e interações; e (iii) evoluir o Hamiltoniano total  $H = H'_0 + H_1$  até  $T_{\min} = \frac{\pi}{2\sqrt{2}}\tau_0$ . Para o CNOT, os parâmetros para o  $H_{\text{CNOT}}$  podem ser encontrados numericamente para implementar a porta em  $t = T_{\min}$ , que são  $\Delta = 2.122$  e  $\Gamma = 0.707$ .

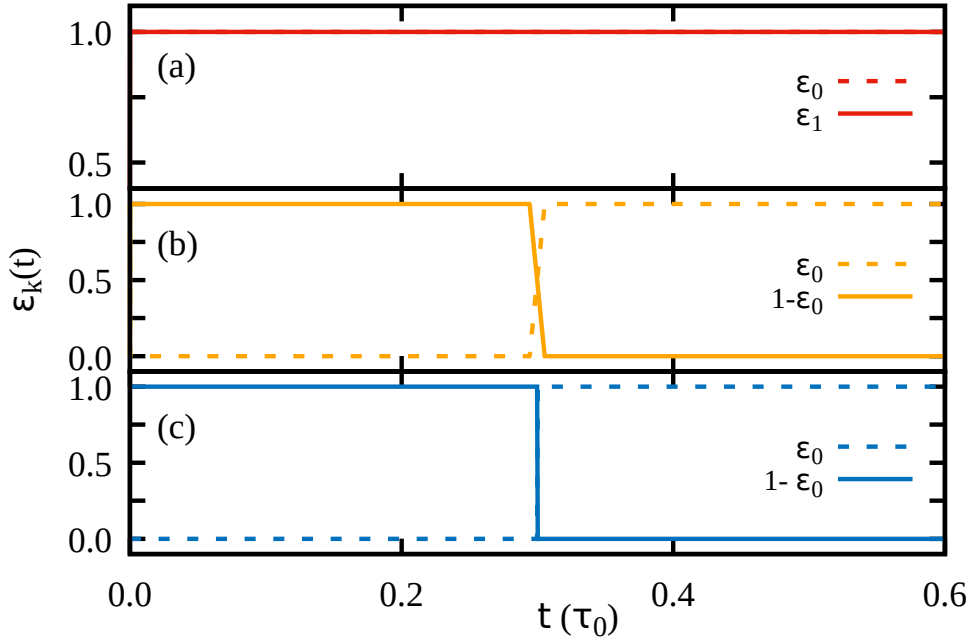
Dentro do método TBQCP, impomos limites nas funções de dois controles fixando os valores das funções no limite máximo ou mínimo sempre que as funções cruzam esses limites. Para entender melhor essa ideia, plotamos  $\varepsilon_0(t)$  considerando diferentes iterações do TBQCP no painel (a) da figura 3.2 quando o tempo final é  $T = 1.0\tau_0$ . A função tentativa inicial (interação 0) é  $\varepsilon_0(t) = 1 - t/T$ . Após 100 iterações, a função  $\varepsilon_0(t)$  começa a dobrar, mas não cruza nenhum limite do intervalo  $[0, 1]$ . Por outro lado, o método TBQCP encontra funções que cruzam o limite superior após 200 iterações e forçamos a função ao valor máximo dentro da região onde a função encontrada pelo TBQCP cruzaria o limite superior. A função  $\varepsilon_0(t)$  se torna constante e atinge o limite superior em toda a evolução temporal, após 1400 iterações do método TBQCP. Um comportamento semelhante é encontrado para  $\varepsilon_1(t)$  (não mostrado aqui). No painel (b) da figura 3.2, mostramos a fidelidade  $F(T)$  como uma

função das iterações do TBQCP, que converge para 0.9763 após 500 iterações. Para todos os cálculos numéricos, usamos  $\eta = 5 \times 10^{-3}$  na Eq.(3.17). No painel (c) da figura 3.2, plotamos a função  $\varepsilon_0(t)$  dentro do esquema de otimização de um controle como uma função das iterações do método TBQCP, que cruza os limites após 300 iterações. Após 1400 iterações, a função  $\varepsilon_0(t)$  se assemelha a uma função degrau, de forma semelhante às funções obtidas na abordagem QAOA. A fidelidade  $F(T)$  como função das iterações do TBQCP para o terceiro esquema é mostrada no painel (d) da figura 3.2, atingindo a convergência de 0.729 após 1000 iterações.

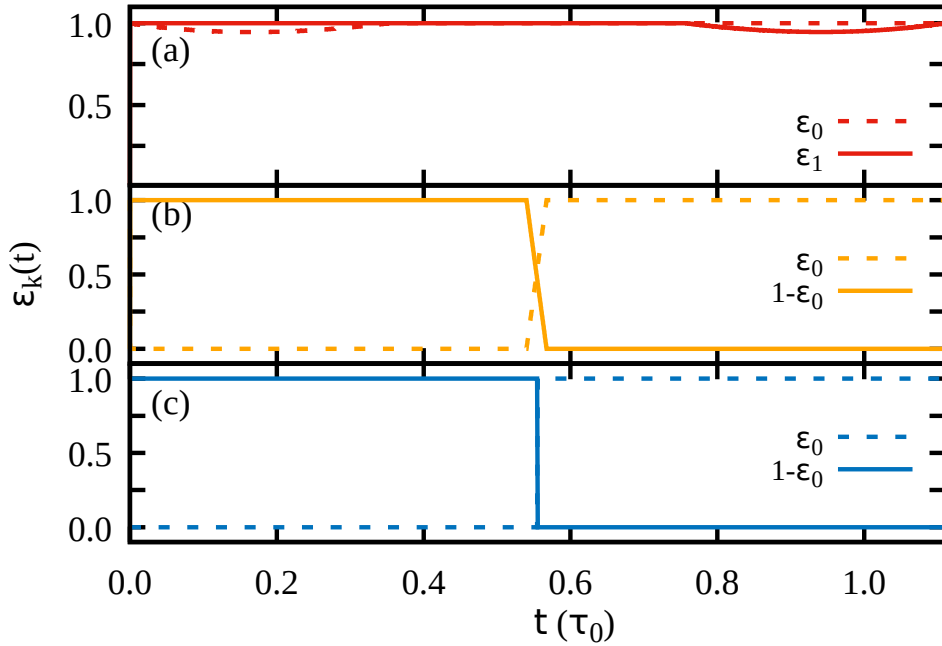


**Figura 3.2:** Os painéis (a) e (c) mostram o controle  $\varepsilon_0(t)$  de 0 a 1400 iterações do método TBQCP, com passo de 100 iterações, para o segundo e terceiro esquemas, respectivamente. O número de iterações aumenta na direção indicada pelas setas e o gradiente de cores. Assim, quanto mais escuro for a cor, maior será o número de iterações no TBQCP. A fidelidade  $F(T)$  como função do número de iterações no método TBQCP, usando o segundo e terceiro esquemas, são mostradas nos painéis (b) e (d), respectivamente.

Nas figuras 3.3 a 3.5, mostramos os controles ótimos convergidos  $\varepsilon_0(t)$  (linhas tracejadas) e  $\varepsilon_1(t)$  (linhas sólidas) obtidos para diferentes tempos finais. Em cada uma dessas figuras, os painéis (a) a (c) mostram os controles utilizando a otimização com dois controles, a otimização com um controle e o esquema QAOA. No painel (a) da figura 3.3, observamos que a solução para a otimização com dois controles usando o método TBQCP corresponde à solução de “double-bang”, o que está em perfeito acordo com os resultados gerais obtidos na seção 3.2. A otimização com um controle e o QAOA fornecem soluções similares para os controles (painéis (b) e (c)), o que indica que a abordagem QAOA com  $p = 1$  está muito próxima da solução ótima para  $T = 0.6\tau_0$ . É interessante observar também que o segundo esquema, inicializado com a rampa linear suave do LAE, convergiu para controles com comportamento

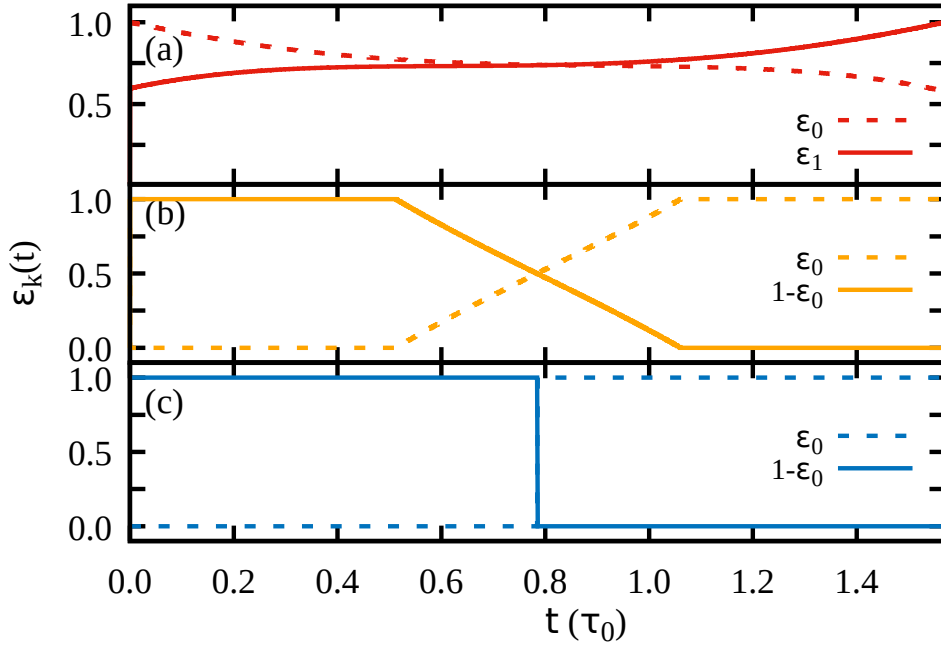


**Figura 3.3:** Controles otimizados  $\varepsilon_0(t)$  (linhas tracejadas) e  $\varepsilon_1(t)$  (linhas sólidas) em função do tempo para todos os esquemas considerados para o tempo final  $T = 0.6\tau_0$ . A otimização de dois controles, a otimização de um controle e o esquema QAOA são mostrados nos painéis (a) a (c), respectivamente.



**Figura 3.4:** Controles otimizados  $\varepsilon_0(t)$  (linhas tracejadas) e  $\varepsilon_1(t)$  (linhas sólidas) em função do tempo para todos os esquemas considerados para o tempo final  $T = 1.11\tau_0$ . A otimização de dois controles, a otimização de um controle e o esquema QAOA são mostrados nos painéis (a) a (c), respectivamente.

oposto em comparação com o LAE, ou seja,  $\varepsilon_0(0) > \varepsilon_1(0)$  no esquema do LAE, mas  $\varepsilon_1(0) > \varepsilon_0(0)$  para as soluções otimizadas.



**Figura 3.5:** Controles otimizados  $\varepsilon_0(t)$  (linhas tracejadas) e  $\varepsilon_1(t)$  (linhas sólidas) em função do tempo para todos os esquemas considerados para o tempo final  $T = 1.8\tau_0$ . A otimização de dois controles, a otimização de um controle e o esquema QAOA são mostrados nos painéis (a) a (c), respectivamente.

Na figura 3.4, plotamos os controles resultantes considerando o tempo mínimo  $T_{\min} = 1.11\tau_0$ . No painel (a) da figura 3.4, observamos que a solução para a otimização com dois controles usando o TBQCP não é exatamente igual à solução de “double-bang”, mas ambas as soluções são equivalentes e fornecem o mesmo valor para  $\langle H_1(T_{\min}) \rangle$ . Novamente, a solução com um controle (painel (b)) é similar à abordagem QAOA (painel (c)) com  $p = 1$ , sendo que a principal diferença é a transição mais suave entre 0 e 1 para o terceiro esquema. A figura 3.5 mostra as funções de controle para  $T = 1.57\tau_0$ . Nesse caso, o tempo final é maior do que o tempo mínimo, portanto, a otimização com dois controles converge para soluções diferentes da solução de “double-bang”. Também observamos que o esquema de otimização com um controle apresenta uma transição linear suave entre os valores mínimo e máximo das funções de controle, enquanto a abordagem QAOA apresenta um salto em  $t = 0.785\tau_0$ . Embora os controles obtidos de diferentes esquemas tenham uma evolução temporal diferente, a fidelidade é sempre igual a 1 para  $T = 1.57\tau_0$ . Esse resultado está em concordância com o fato de que o espaço de controle contém infinitas soluções ótimas [61].

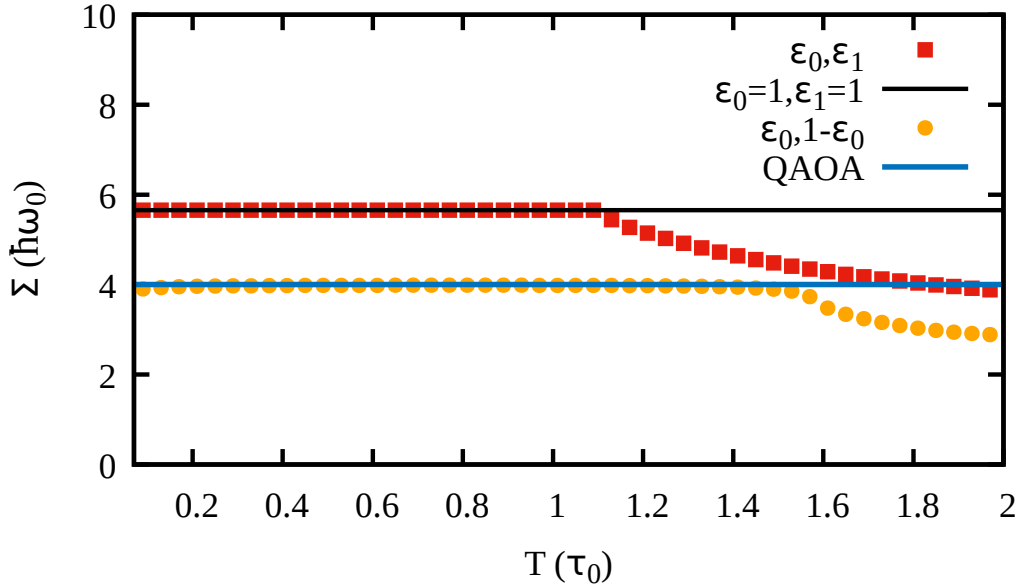
Nós também realizamos a análise do custo energético da implementação desses diferentes esquemas de evolução temporal. Na figura 3.6, plotamos o custo energético



em função do tempo final calculado de acordo com [62, 63]:

$$\Sigma(T) = \frac{1}{T} \int_0^T dt \|H(t)\|, \quad (3.26)$$

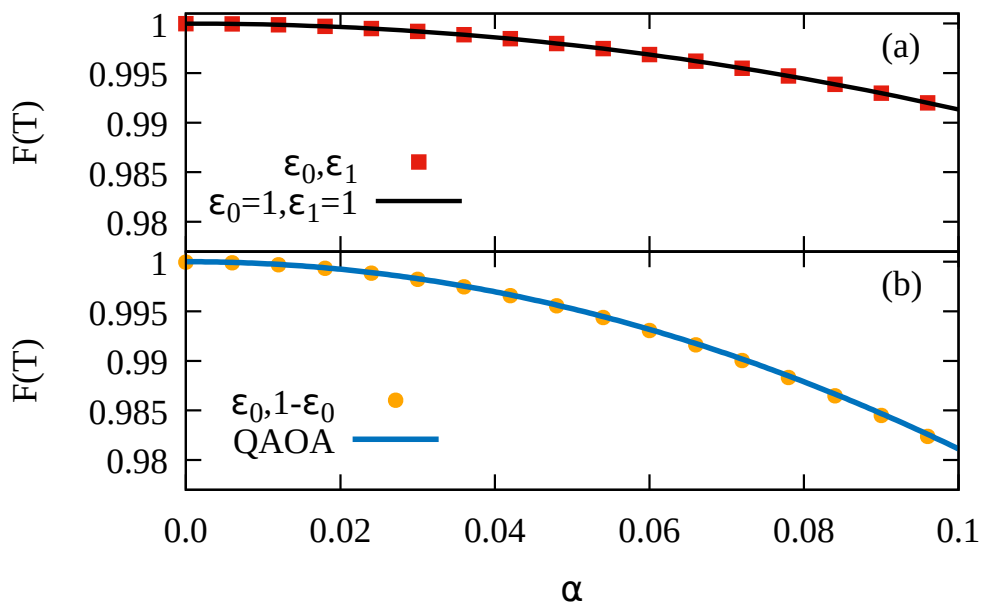
onde  $\|H(t)\| = \sqrt{\text{Tr}\{H(t)^2\}}$ . Observamos que tanto o QAOA quanto a solução “double-bang” têm custo energético constante para todos os valores de  $T$  mostrados na figura 3.6. Esse comportamento é devido à forma constante da função para esses dois casos particulares. O custo energético para a otimização de dois controles e a solução “double-bang” são iguais quando  $T < 1.11\tau_0$ . Acima do tempo mínimo, o primeiro esquema apresenta um custo energético menor do que as soluções “double-bang”. Um comportamento similar ocorre quando comparamos o terceiro e o quarto esquemas, ou seja, acima de  $T = 1.57\tau_0$ , o terceiro esquema tem um custo energético menor do que a abordagem QAOA. Os resultados da figura 3.6 mostram que as soluções encontradas pela técnica TBQCP têm um custo energético menor quando  $T > T_{\min}$ , porque soluções ótimas com amplitudes menores do que o limite máximo são possíveis nesse caso.



**Figura 3.6:** Custo energético em função do tempo final para o primeiro (curva pontilhada vermelha), segundo (curva sólida preta), terceiro (curva pontilhada laranja) e quarto (curva sólida azul) esquemas de otimização.

Para investigar a robustez dos esquemas de otimização em relação a erros sistemáticos, adicionamos um Hamiltoniano de erro dado por  $H_{\text{err}} = \alpha\omega_0\sigma_k^j$  à equação (3.1), onde  $\alpha$  é proporcional à magnitude do campo magnético local. Podemos encontrar o tipo mais agressivo de erro sistemático testando todas as combinações diferentes de  $\sigma_k^j$  e mantendo aquela que afeta mais a fidelidade. A fidelidade na figura 3.7

é avaliada usando os controles otimizados, mas a evolução temporal é calculada incluindo o Hamiltoniano de erro  $H_{\text{err}}$  na Eq. (3.1). O painel superior da figura 3.7 mostra a fidelidade como função de  $\alpha$  considerando  $T = T_{\text{min}}$  para a otimização de dois controles e a solução de “double-bang”. Para o tempo mínimo  $T_{\text{min}} = 1.11\tau_0$ , a otimização de dois controles não converge exatamente para a solução de “double-bang” (ver figura 3.4), mas ambas as soluções exibem a mesma fidelidade em função da magnitude do erro  $\alpha$  (painel (a) da figura 3.7). Da mesma forma, a fidelidade como função de  $\alpha$  considerando  $T = 1.57\tau_0$  para a otimização de um controle e a solução QAOA exibem a mesma dependência da fidelidade em função da magnitude do erro  $\alpha$ , como mostrado no painel (b) da figura 3.7. Embora todos os esquemas atinjam a fidelidade máxima quando  $\alpha = 0$ , descobrimos que o primeiro e o segundo esquemas são mais robustos contra erros sistemáticos, e um erro de 10% ( $\alpha = 0.1$ ) causa uma redução de 1.7% na fidelidade.



**Figura 3.7:** No painel (a), traçamos a fidelidade em função da magnitude  $\alpha$  do tipo mais agressivo de erro sistemático considerando o primeiro (curva pontilhada vermelha) e o segundo (curva sólida preta) esquemas de evolução temporal quando  $T = 1.11\tau_0$ . No painel (b), traçamos a fidelidade em função de  $\alpha$  para o terceiro (curva sólida azul) e o quarto (curva pontilhada laranja) esquemas de evolução temporal quando  $T = 1.57\tau_0$ .

# Capítulo 4

## Método de Krotov aplicado à computação quântica adiabática considerando sistemas abertos

### 4.1 Introdução

Como foi dito no capítulo 3, estamos na era NISQ, na qual há dispositivos com o potencial de superar o poder dos computadores clássicos [35]. Esses dispositivos não alcançam os tempos de coerência desejados para se realizar a computação quântica universal e portanto são sistemas que apresentam erros devido à interação com o ambiente externo que os cercam. Esses sistemas são abertos, em contraste com os sistemas quânticos fechados que não interagem com o ambiente externo e mantêm suas correlações quânticas intactas.

Neste capítulo, analisamos o problema de computação quântica adiabática usando a teoria de controle ótimo aplicada a um sistema quântico aberto. Para fazermos tal estudo, utilizaremos dois diferentes protocolos. O primeiro está relacionado à geração de um estado emaranhado de dois qubits e o segundo é justamente o protocolo de teletransporte já analisado no capítulo 3. No entanto, neste capítulo estamos interessados em estudar estratégias para mitigar os efeitos dissipativos causados pelo ambiente externo através da teoria de controle ótimo. Desse modo, os protocolos quânticos serão analisados dentro do contexto da dinâmica governada pela equação mestra.

## 4.2 Protocolo de emaranhamento adiabático

Começamos analisando um problema em que dois qubits estão inicialmente em estados separados e evoluem para um estado emaranhado no tempo final. O hamiltoniano dependente do tempo é dado por:

$$H = \varepsilon_0(t)H_0 + \varepsilon_1(t)H_1, \quad (4.1)$$

onde

$$H_0 = \hbar\omega_0 (\sigma_z \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \sigma_z), \quad (4.2)$$

$$H_1 = \hbar\omega_0 (\sigma_y \otimes \sigma_y - \sigma_z \otimes \sigma_z). \quad (4.3)$$

Os estados fundamentais de ambos os hamiltonianos  $H_0$  e  $H_1$  são dados respectivamente por:

$$|\psi_0\rangle = |11\rangle, \quad (4.4)$$

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle), \quad (4.5)$$

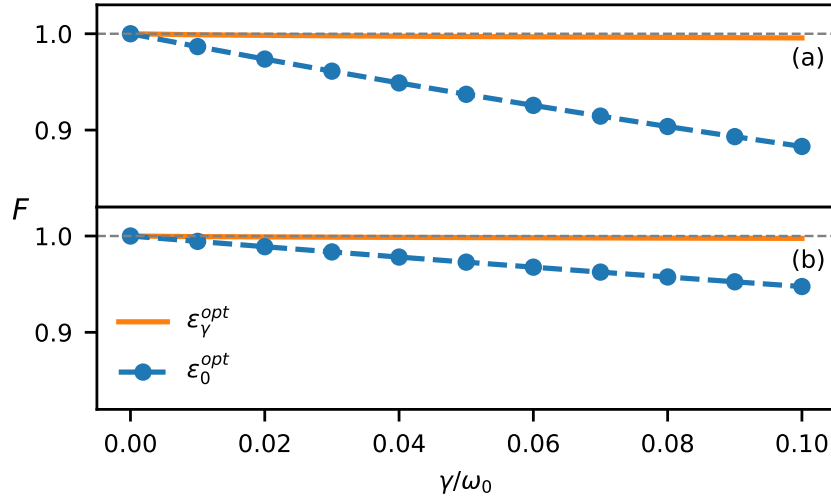
onde  $|\psi_0\rangle$  é o estado inicial separado e  $|\psi_1\rangle$  é o estado emaranhado desejado no tempo final de evolução. Sob a dinâmica unitária, esse objetivo é facilmente alcançado pelo método adiabático. Para levar em conta a dinâmica não unitária, usamos a conhecida equação mestra de Markov,

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \frac{1}{2} \sum_j \gamma_j \left( 2L_j \rho L_j^\dagger - L_j^\dagger L_j \rho - \rho L_j^\dagger L_j \right), \quad (4.6)$$

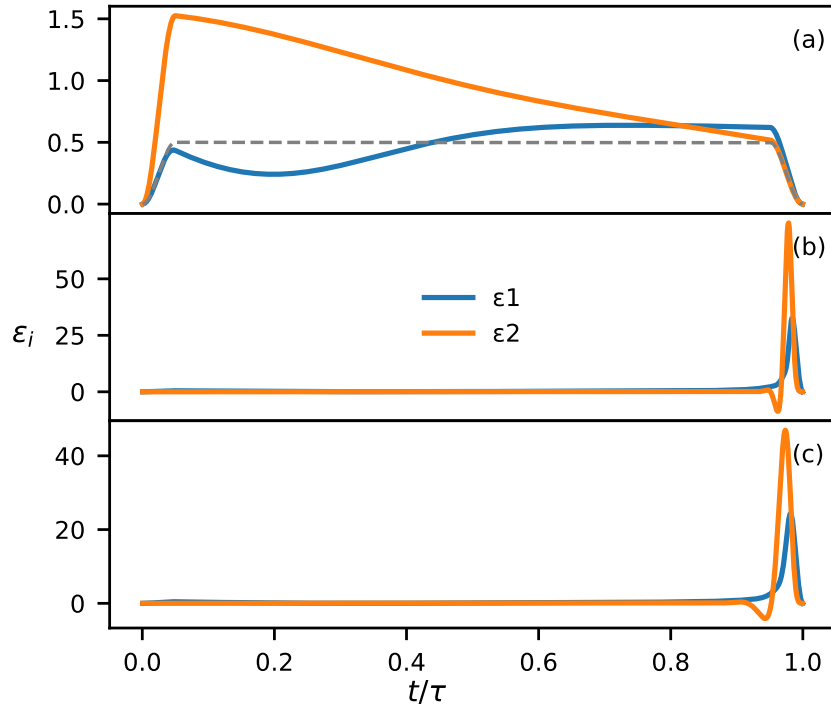
onde o primeiro termo no lado direito descreve a evolução unitária e o segundo termo leva em conta a dissipação. Os  $L_j$  são operadores de Lindblad e  $\gamma_j$  são as taxas de decaimento correspondentes. Nessa situação, utilizamos o método de Krotov para buscar os campos de controle ótimos  $\varepsilon_0(t)$  e  $\varepsilon_1(t)$  que maximizam a fidelidade em relação ao tempo final de evolução. A fidelidade pode ser calculada da seguinte forma:

$$F = \left( \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\chi} \rho(T) \sqrt{\chi}} \right)^2, \quad (4.7)$$

onde  $\rho(T)$  é a solução da Eq. (4.6) no tempo final de evolução  $T$  e  $\chi$  é a matriz de densidade do estado alvo. Para o caso particular de geração de emaranhamento,  $\chi = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ . Utilizamos dois tipos diferentes de operadores de Lindblad, relacionados ao canal de dephasing e ao canal de amplitude-damping.

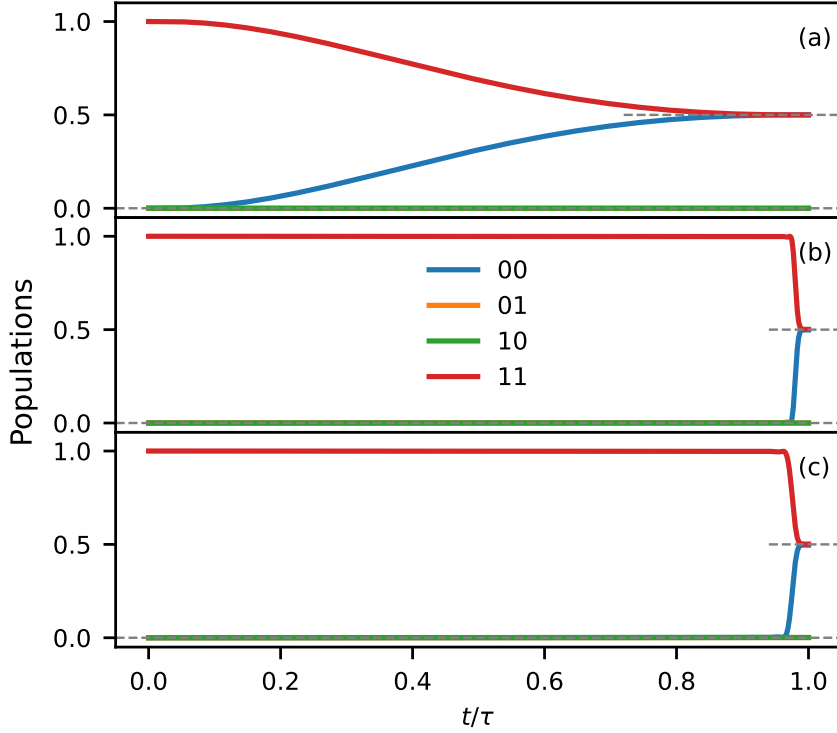


**Figura 4.1:** Fidelidade avaliada pela Eq. (4.7) para o protocolo de emaranhamento adiabático considerando erros de dephasing (painel (a)) e de amplitude-damping (painel (b)) em função da taxa de decaimento  $\gamma$ , utilizando a função de controle otimizada obtida a partir da dinâmica unitária (curva pontilhada azul) e da dinâmica não-unitária (curva contínua laranja)



**Figura 4.2:** Funções de controle otimizadas  $\varepsilon_i(t)$  obtidas com a restrição de evoluir o sistema do estado da Eq.(4.4) para o estado da Eq.(4.5). O painel (a) refere-se a uma otimização unitária, que não depende do tipo de ruído. Os painéis (b) e (c) mostram as funções de controle otimizadas para uma taxa de decaimento fixa  $\gamma = 0.1$ , considerando os erros de dephasing e amplitude-damping, respectivamente.

Para o qubit, a soma na Eq.(4.6) contém os termos  $j = 1, 2$  e o operador de Lindblad é ou  $L_1 = \sigma_z \otimes \mathbb{1}$  e  $L_2 = \mathbb{1} \otimes \sigma_z$  (dephasing) ou  $L_1 = \sigma_- \otimes \mathbb{1}$  e  $L_2 = \mathbb{1} \otimes \sigma_-$  (amplitude-



**Figura 4.3:** População dos estados em função do tempo para o protocolo de emaranhamento adiabático, resultante da evolução unitária, mostrado no painel (a). Os painéis (b) e (c) mostram a população dos estados em função do tempo para o protocolo de emaranhamento adiabático com uma taxa de decaimento fixa  $\gamma = 0.1$ , resultante dos ruídos de dephasing e amplitude-damping, respectivamente.

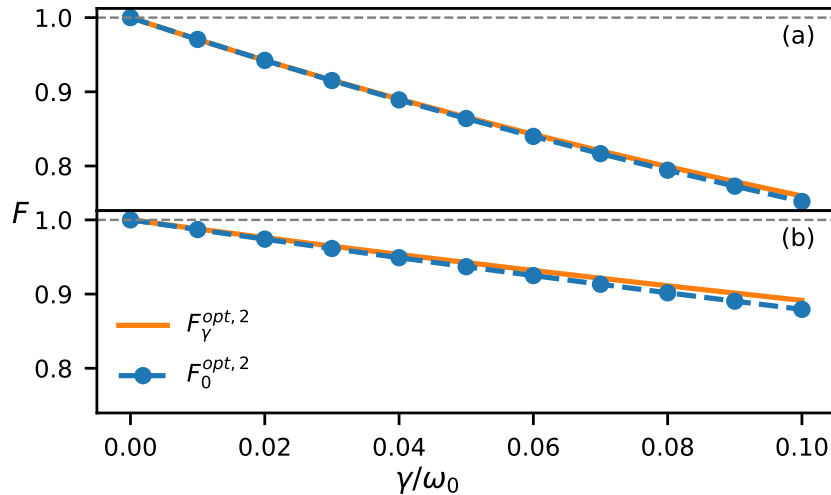
damping), onde  $\sigma_- = (\sigma_x - i\sigma_y)/2$ . Na figura 4.1, traçamos a fidelidade em função da taxa de decaimento  $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$  para ambos os tipos de operadores de Lindblad, a desfasagem (figura 4.1(a)) e o amplitude-damping (figura 4.1(b)). É notável que a fidelidade é sempre maior do que 0.997 para todos os intervalos de  $\gamma$  usados na figura 4.1, quando a otimização é avaliada usando a dinâmica não unitária. Também comparamos esses resultados com a otimização usando os campos de controle obtidos para  $\gamma = 0$ , mas a fidelidade é avaliada através da evolução temporal obtida usando Eq.(4.6) para diferentes valores de  $\gamma$ . Nesse caso, a fidelidade diminui à medida que a taxa de decaimento aumenta. Para entender a grande diferença entre a otimização unitária e não unitária, mostramos os campos otimizados considerando a otimização unitária ( $\gamma = 0$ ) e não unitária ( $\gamma = 0.1$  para ambos os tipos de ruído de dephasing e amplitude-damping) na figura 4.2. Os campos obtidos a partir da dinâmica unitária são suaves e têm uma amplitude muito pequena (figura 4.2(a)) quando comparados aos campos obtidos da dinâmica não unitária (figura 4.2(b) e (c)). Além disso, os campos para  $\gamma = 0.1$  apresentados na figura 4.2(b) e (c) são próximos de zero na maior parte do tempo. Somente no final da evolução temporal, os campos de controle se comportam como pulsos fortes que são capazes de alcançar o estado alvo desejado. Para entender melhor esse comportamento, traçamos a população dos

estados na figura 4.3. A população é inicialmente definida como igual a um para o estado  $|\psi_0\rangle = |11\rangle$ . Quando  $\gamma = 0$ , a população do estado  $|00\rangle$  aumenta, enquanto a população do estado  $|11\rangle$  aumenta em função do tempo. No tempo final da evolução, a população de ambos os estados  $|00\rangle$  e  $|11\rangle$  alcança 0.5, que é o valor desejado. Por outro lado, o sistema permanece no estado inicialmente preparado  $|11\rangle$  pelo maior tempo possível quando  $\gamma = 0.1$ , enquanto outros estados não são populados. Somente no final da evolução temporal, o estado  $|00\rangle$  é populado e o estado alvo é alcançado com alta fidelidade no tempo final (veja figura 4.3(b) e (c)). Esse resultado está relacionado ao fato de que a otimização não unitária está buscando campos ótimos que minimizem os efeitos dissipativos. Uma possível maneira de realizar essa tarefa é deixar o sistema em estados que sejam menos afetados ou não sejam afetados pela dissipação. Nesse caso, o estado inicial não sofre de decaimento espontâneo (ruído de amplitude-damping) ou efeitos de dephasing porque é um estado separado sem coerência.

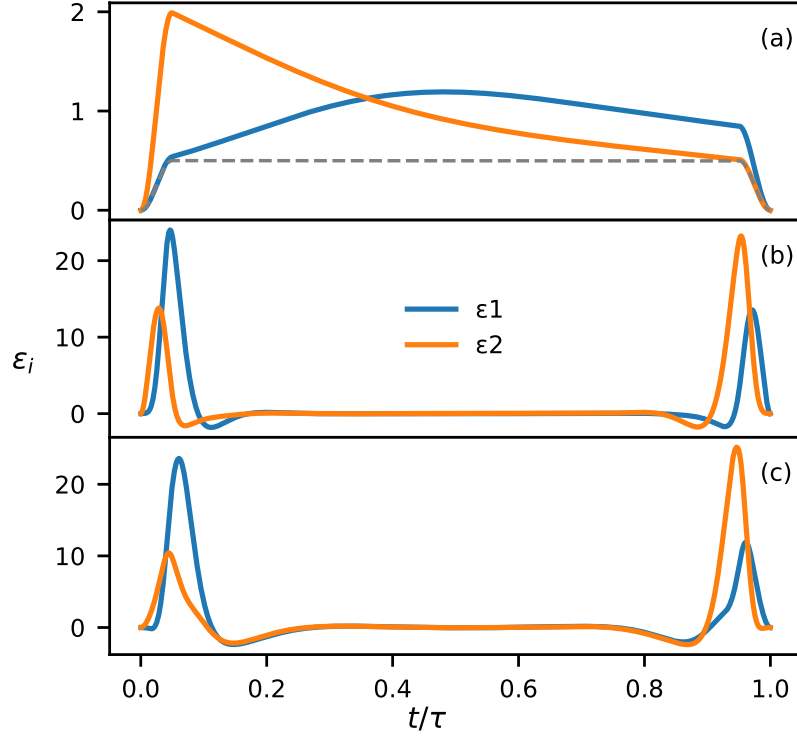
### 4.3 Protocolo de teletransporte adiabático

Como segundo exemplo da análise de dissipação na OCT aplicada à abordagem de computação quântica adiabática, usamos o protocolo de teletransporte. Neste protocolo, há três qubits sujeitos ao seguinte Hamiltoniano:

$$H_0 = -\hbar\omega_0 (\sigma_x^{(2)}\sigma_x^{(3)} + \sigma_z^{(2)}\sigma_z^{(3)}), \quad (4.8)$$



**Figura 4.4:** Fidelidade avaliada pela Eq.(4.7) para o protocolo de teletransporte considerando erros de dephasing (painel (a)) e de amplitude-damping (painel (b)) em função da taxa de decaimento  $\gamma$ . A fidelidade avaliada para Hamiltonianos de dois controles do tipo da Eq.(4.1) obtidos a partir da dinâmica unitária (não unitária) é mostrada pela curva pontilhada azul (curva contínua laranja).



**Figura 4.5:** Funções de controle otimizadas  $\varepsilon_i$  obtidas para o protocolo de teletransporte adiabático usando o Hamiltoniano descrito nas equações (4.8) e (4.9). O painel (a) refere-se a uma otimização unitária ( $\gamma = 0$ ). Os painéis (b) e (c) mostram as funções de controle otimizadas para uma taxa de decaimento fixa  $\gamma = 0.1$  considerando os erros de dephasing e amplitude-damping, respectivamente.

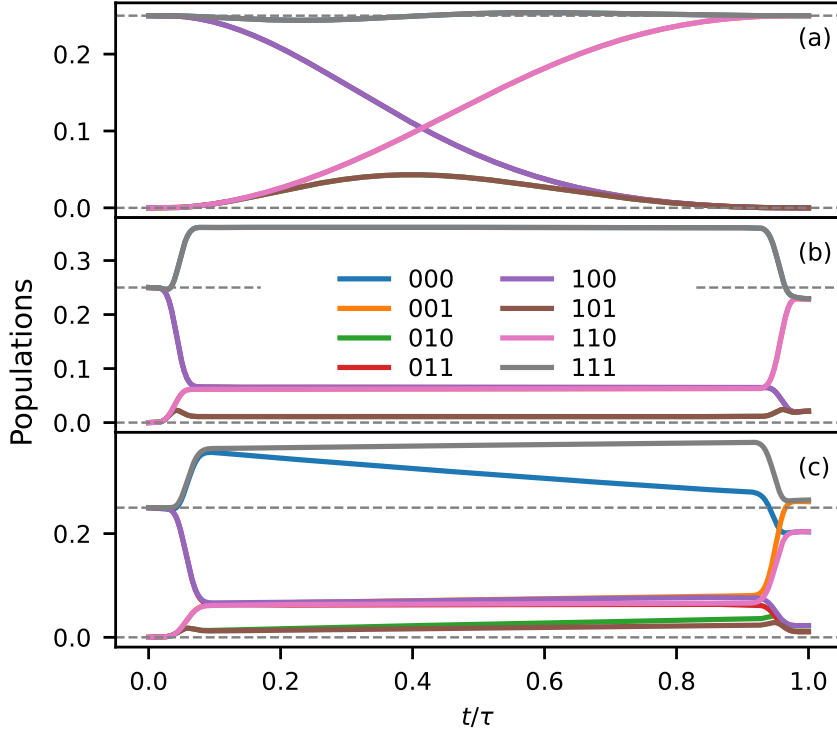
cujo estado fundamental é duas vezes degenerado  $|\phi_0^{(1)}\rangle = |0\rangle \otimes |\Phi\rangle$  e  $|\phi_0^{(2)}\rangle = |1\rangle \otimes |\Phi\rangle$ , onde  $|\Phi\rangle$  é um estado de Bell,  $|\Phi\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$ , e  $\sigma_m^{(j)}$  é a matriz de Pauli de spin na direção  $m$  atuando no  $j$ -ésimo qubit. O segundo Hamiltoniano é:

$$H_1 = -\hbar\omega_0 (\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)} + \sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)}), \quad (4.9)$$

cujo estado fundamental é também duas vezes degenerado, sendo  $|\chi_0^{(1)}\rangle = |\Phi\rangle \otimes |0\rangle$  e  $|\chi_0^{(2)}\rangle = |\Phi\rangle \otimes |1\rangle$ . Este protocolo tem como objetivo teleportar a informação inicialmente codificada no primeiro qubit para o terceiro qubit no tempo final de evolução, o que é equivalente a um gate de swap. A fidelidade na Eq.(4.7) pode ser avaliada considerando  $|\chi\rangle = |\chi_0\rangle$ , que pode ser escolhido como qualquer combinação linear dos estados  $|\chi_0^1\rangle$  e  $|\chi_0^2\rangle$  sem perda de generalidade[25]. Como já discutido em Ref. [25], portas de um qubit podem ser obtidas pela transformação unitária do Hamiltoniano de controle  $H'_0 = U_G H_0 U_G^\dagger$ , onde  $U_G$  é uma porta de um qubit atuando no terceiro qubit, que pode ser obtida por campos magnéticos locais.

A mesma ideia pode ser generalizada para implementar portas de dois qubits (veja [25] para mais detalhes). Para descrever os efeitos dissipativos, escolhemos operadores de Lindblad independentes dados por  $L_i = s^{(i)}$ , onde  $i = 1, 2, e, 3$  é o índice relacionado





**Figura 4.6:** População dos estados em função do tempo para o protocolo de teletransporte adiabático considerando duas funções de controle, resultantes da evolução unitária mostrada no painel (a). Os painéis (b) e (c) mostram a população dos estados em função do tempo para o protocolo adiabático com uma taxa de decaimento fixa  $\gamma = 0.1$  resultante dos ruídos de dephasing e amplitude-damping, respectivamente.

ao qubit em que o operador está atuando, por exemplo, o operador de Lindblad atuando no primeiro qubit é  $L_1 = s \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}$ , onde  $s = \sigma_- = |1\rangle\langle 0|$  para amplitude-damping e  $s = \sigma_z$  para dephasing. Quando aplicamos o Método de Krotov (KM) ao protocolo de teletransporte, o desempenho da fidelidade avaliada considerando a otimização não unitária é quase o mesmo que o encontrado pela otimização unitária, como pode ser observado na figura 4.4 (a) e (b). Os campos de controle otimizados para a unidade (painel (a)), dephasing (painel (b)) e amplitude-damping (painel (c)) são mostrados na figura 4.5. Para o protocolo de teletransporte, a otimização não unitária resulta em campos de controle que alcançam amplitudes dez vezes maiores do que a amplitude dos campos de controle otimizados unitariamente. Além disso, os campos de controle não unitários são compostos por pulsos no início e no final da dinâmica, em contraste com a forma sempre ativada dos campos de controle obtidos na otimização unitária. Ao analisar a dinâmica das populações dos estados na figura 4.6, podemos compreender as trajetórias encontradas pela otimização unitária e não unitária. Nós utilizamos uma combinação linear do estado fundamental do Hamiltoniano  $H_1$ , duas vezes degenerado, como estado inicial na otimização, sendo  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|00\rangle + |11\rangle)$ . O estado final correspondente deve ser igual a  $|\psi(T)\rangle = \frac{1}{2} (|00\rangle + |11\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle)$ . A ocupação do estado  $|011\rangle$

diminui suavemente à medida que aumenta a amplitude do estado  $|101\rangle$ , e o estado  $|101\rangle$  é populado durante a dinâmica obtida pelos campos de controle otimizados unitariamente (veja figura 4.6(a)). Quando a otimização não unitária é considerada, a ocupação dos estados  $|111\rangle$  e  $|001\rangle$  aumenta rapidamente, enquanto a população do estado  $|011\rangle$  diminui. A população desses três estados é mantida constante durante a dinâmica até que os pulsos finais mostrados na figura 4.5(b) e (c) comecem a atuar. Nesse caso, a ocupação dos estados  $|111\rangle$  e  $|001\rangle$  diminui rapidamente, e a população do estado  $|011\rangle$  aumenta para alcançar o estado alvo. Embora a otimização unitária e não unitária usem caminhos diferentes para alcançar o estado alvo, o efeito na fidelidade do protocolo de teletransporte não é tão benéfico quanto o encontrado na EAP. Acreditamos que a razão para essa melhora inferior da fidelidade em função da taxa de decaimento, como observado na figura 4.4 em comparação com a EAP (veja figura 4.1), está relacionada à simetria do Hamiltoniano proposto para implementar o protocolo de teletransporte usando computação quântica adiabática. Como estamos investigando a aplicação da OCT no contexto da abordagem de computação quântica adiabática, podemos analisar os efeitos da inclusão de um Hamiltoniano adicional. Nesse caso, temos o Hamiltoniano dependente do tempo dado por

$$H = \varepsilon_0(t)H_0 + \varepsilon_1(t)H_1 + \varepsilon_2(t)H_2, \quad (4.10)$$

Onde o Hamiltoniano extra é escolhido como um campo local  $H_2 = \sigma_j^{(k)}$ . Testamos todas as combinações de campos locais e obtivemos os resultados apresentados na tabela 4.1, que mostram a fidelidade para cada tipo de  $H_2$  considerando tanto o ruído de dephasing quanto o ruído de amplitude-damping com  $\gamma = 0.1$ . Os testes para encontrar o melhor  $H_2$  foram feitos utilizando como estado inicial e o seu alvo, os seguintes estados

$$|\psi_{\text{ini}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |\Phi\rangle \quad (4.11a)$$

$$|\psi_{\text{tgt}}\rangle = |\Phi\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \quad (4.11b)$$

O campo local que produz a maior fidelidade é  $H_2 = \sigma_z^{(3)}$  (para dephasing) e  $H_2 = \sigma_z^{(2)}$  (para amplitude-damping), mas campos locais aplicados na direção  $z$  em qualquer um dos qubits têm um efeito similar.

Na figura 4.7 (a) e (b), traçamos a fidelidade como uma função da taxa de decaimento para os tipos de ruído de amplitude-damping e dephasing, considerando o Hamiltoniano extra. Pode-se observar na figura 4.7 que a fidelidade calculada com os campos de controle obtidos da otimização não-unitária é maior do que aquela calculada a partir da otimização unitária. Para  $\gamma = 0.1$ , o ganho é da ordem de

$H_2$	Dephasing	Amplitude-damping
$\sigma_x^{(1)}$	0.768959	0.924558
$\sigma_x^{(2)}$	0.768192	0.925160
$\sigma_x^{(3)}$	0.770457	0.924571
$\sigma_y^{(1)}$	0.845689	0.961643
$\sigma_y^{(2)}$	0.844365	0.960947
$\sigma_y^{(3)}$	0.845620	0.960374
$\sigma_z^{(1)}$	0.898144	0.968651
$\sigma_z^{(2)}$	0.896896	0.970074
$\sigma_z^{(3)}$	0.898513	0.967865

**Tabela 4.1:** Fidelidades obtidas ao acrescentar um terceiro Hamiltoniano de controle  $H_2$ . A adição de  $H_2$  resultou em melhorias na fidelidade. O estado inicial e o respectivo alvo são os estados das equações 4.11.

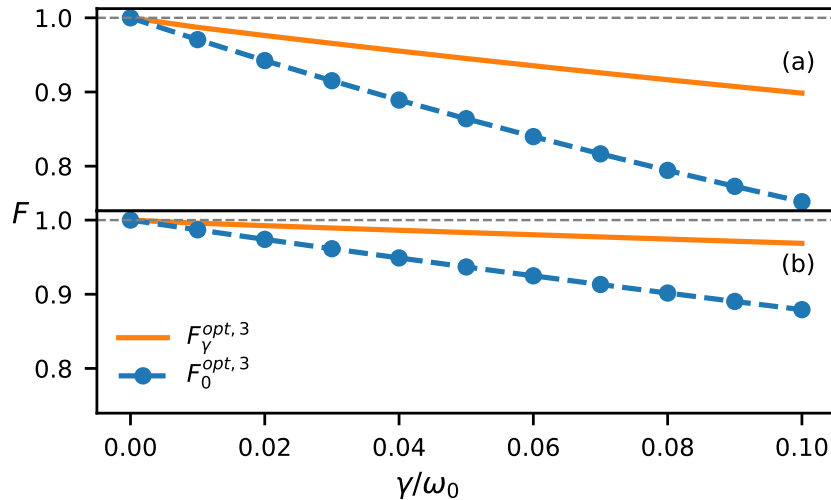
19% para o dephasing e 10% para o amplitude-damping quando três Hamiltonianos são levados em consideração. Esse resultado pode ser compreendido por meio da análise dos campos de controle e da dinâmica da população. Novamente, o método KM encontra pulsos no início e no final da evolução temporal como soluções ótimas para ambos os casos, o dephasing (figura 4.8(a)) e o amplitude-damping (figura 4.8(b)). No caso do dephasing, os pulsos promovem uma transição rápida do estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|00\rangle + |11\rangle)$  para o estado intermediário  $|\psi_I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |11\rangle$ , como mostrado na figura 4.9(b). Apenas o primeiro qubit desse estado intermediário é afetado pelo ruído de dephasing, o que reduz o erro, pois está atuando apenas em um qubit. No final da evolução temporal, os pulsos transformam o estado intermediário no estado alvo. No caso do amplitude-damping, o estado intermediário é proporcional a  $|\psi_I\rangle = |11\rangle \otimes (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)$ . Novamente, apenas o terceiro qubit é afetado pelo ruído, como pode ser visto na figura 4.9(c), onde a população do estado  $|110\rangle$  diminui, enquanto a população do estado  $|111\rangle$  aumenta em função do tempo.

Tais resultados mostram que a inclusão apropriada de um Hamiltoniano local extra pode melhorar a fidelidade, uma vez que diferentes trajetórias podem ser acessadas. Como prova da robustez da abordagem de inclusão do Hamiltoniano extra, avaliamos a fidelidade média considerando uma grande quantidade de estados diferentes que devem ser teleportados do primeiro para o terceiro qubit. A fidelidade média é

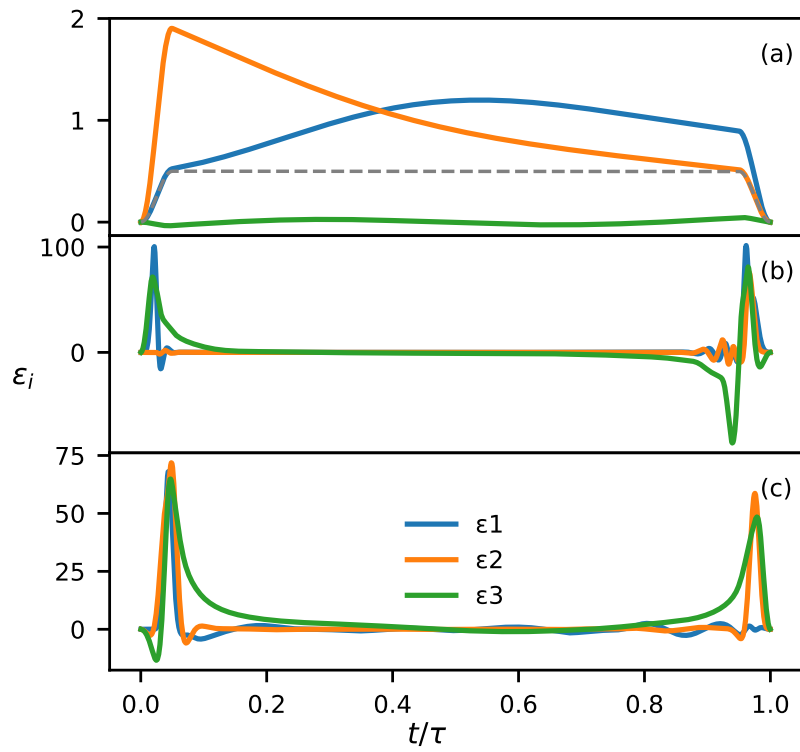
avaliada de acordo com a seguinte fórmula:

$$\langle F \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \psi_i | O^\dagger \rho_i(T) O | \psi_i \rangle, \quad (4.12)$$

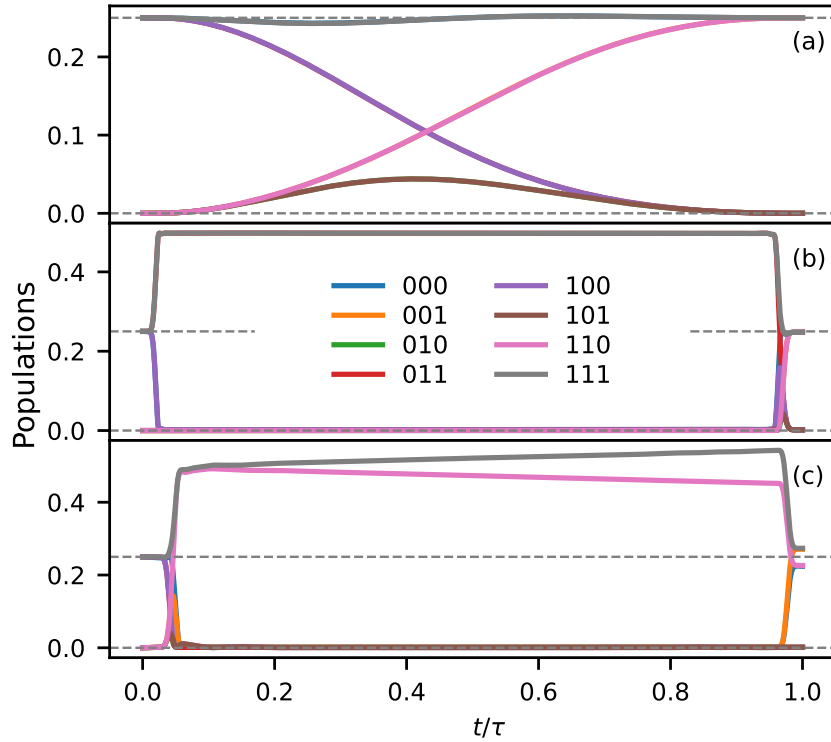
onde  $|\psi_i\rangle = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes |\Phi\rangle$  é um estado inicial específico de um conjunto de  $N$  estados,  $O|\psi_i\rangle = |\Phi\rangle \otimes (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)$ , e  $\rho_i(T)$  é a matriz de densidade correspondente à evolução temporal do estado inicial  $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$  pela Eq. (4.6). Os números complexos  $\alpha$  e  $\beta$  são números aleatórios gerados através da distribuição normal [74]. Na figura 4.10, plotamos a fidelidade média como função da taxa de decaimento para  $N=20000$  estados, considerando os campos otimizados avaliados apenas para o estado inicial  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|00\rangle + |11\rangle)$ . A fidelidade média, denotada por  $\langle F_\gamma^3 \rangle$  e  $\langle F_\gamma^2 \rangle$ , é avaliada considerando o Hamiltoniano total com ou sem o termo extra, respectivamente. Pode-se observar que a fidelidade média avaliada considerando o termo extra  $\langle F_\gamma^3 \rangle$  apresenta um desempenho melhor do que o  $\langle F_\gamma^2 \rangle$ . Por exemplo, o ganho de incluir o termo extra na fidelidade média é da ordem de 18% (ver Fig. 4.10(a)) para dephasing e 8% (ver Fig. 4.10(b)) para amplitude-damping quando  $\gamma = 0.1$ .



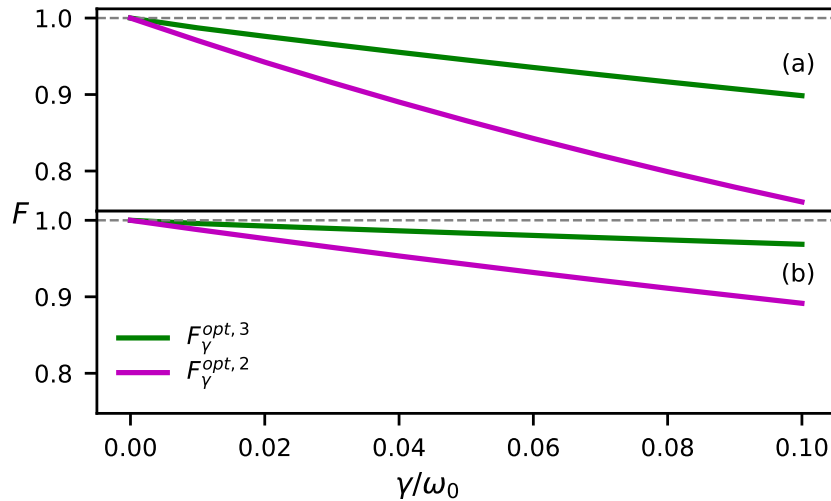
**Figura 4.7:** A fidelidade avaliada pela Equação (4.7) para o protocolo de teletransporte, considerando erros de dephasing (painel (a)) e amplitude-damping (painel (b)), é mostrada como função da taxa de decaimento  $\gamma$ . A fidelidade é avaliada para as funções de controle otimizadas do Hamiltoniano da Equação (4.10), obtidas a partir da dinâmica unitária (curva pontilhada azul) e não unitária (curva contínua laranja).



**Figura 4.8:** As funções de controle otimizadas  $\varepsilon_i$  obtidas para o protocolo de teletransporte adiabático usando o Hamiltoniano descrito na Equação (4.10) são mostradas na figura. O painel (a) se refere a uma otimização unitária ( $\gamma = 0$ ). Os painéis (b) e (c) mostram as funções de controle otimizadas para uma taxa de decaimento fixa de  $\gamma = 0.1$ , considerando os erros de dephasing e amplitude-damping, respectivamente.



**Figura 4.9:** A população dos estados em função do tempo para o protocolo de teletransporte adiabático considerando três funções de controle, resultantes da evolução unitária, é mostrada no painel (a). Os painéis (b) e (c) mostram a população dos estados em função do tempo para o protocolo de teletransporte adiabático com uma taxa de decaimento fixa de  $\gamma = 0.1$ , resultante dos ruídos de dephasing e de amplitude-damping, respectivamente.



**Figura 4.10:** A fidelidade média, avaliada a partir da Eq. (4.12), considerando  $N=20000$  estados iniciais aleatórios, como função da taxa de decaimento  $\gamma$ . Nos painéis (a) e (b), plotamos, respectivamente, os resultados para os tipos de erro de dephasing e de amplitude-damping, considerando a fidelidade média obtida para duas  $\langle F_\gamma^2 \rangle$  e três funções de controle  $\langle F_\gamma^3 \rangle$ .

## 4.4 Conclusão

Neste estudo, utilizamos o método de Krotov (KM) para sistemas quânticos abertos para investigar numericamente o desempenho da computação quântica adiabática (AQC) em dois casos diferentes: o protocolo de emaranhamento adiabático e o protocolo de teletransporte. Nossos resultados revelaram que o uso do KM para sistemas quânticos abertos oferece benefícios significativos em comparação com a otimização unitária no caso do protocolo de emaranhamento adiabático, uma vez que é capaz de encontrar caminhos melhores para evitar os efeitos prejudiciais do ruído. Essa melhoria na fidelidade é única para sistemas quânticos abertos, já que a otimização unitária não leva em conta os efeitos do ruído. No entanto, observamos que, no caso do protocolo de teletransporte, a fidelidade obtida a partir da otimização não unitária é semelhante à obtida a partir da otimização unitária. Acreditamos que o motivo desse desempenho insatisfatório esteja relacionado ao tipo de Hamiltoniano usado no protocolo de teletransporte adiabático, que não é capaz de encontrar melhores caminhos para a dinâmica não unitária. Para contornar esse problema, propomos a inclusão de um Hamiltoniano extra local. Descobrimos que a função de controle ótima obtida a partir da otimização não unitária, incluindo esse termo extra, beneficia o protocolo de teletransporte em comparação com a otimização unitária. O ganho na fidelidade média pode ser superior a 8% para o maior valor de taxa de decaimento considerado em nossos cálculos. Como a computação quântica deve sempre alcançar altas fidelidades para aplicações práticas, acreditamos que a combinação de KM para sistemas quânticos abertos e a busca por termos extras no Hamiltoniano usado para AQC pode ser muito interessante para aplicações reais. Uma vez que essa conclusão foi alcançada a partir de um conjunto limitado de casos, investigações adicionais devem ser realizadas para verificar sua extensão a outros casos de computação quântica adiabática.

# Capítulo 5

## Método de Krotov aplicado a sistemas quânticos abertos

### 5.1 Introdução

A habilidade de controlar sistemas quânticos na presença de ruído é crucial para a computação quântica, uma vez que este pode levar a efeitos indesejados como a decoerência [6–9]. Existem muitas estratégias para aprimorar o controle de sistemas quânticos na presença de ruído, por exemplo, subespaços livres de decoerência [10–12], desacoplamento dinâmico [13, 14], subsistemas sem ruído [15], e engenharia espectral [16]. Embora benéficas, essas táticas são restritas a sistemas pequenos e geralmente limitadas a tipos específicos de interações ambiente-sistema.

A otimização numérica se torna um método especialmente atraente para lidar com sistemas complicados e formas gerais de interações [17–21]. Em particular, o método de Krotov (KM) tem sido amplamente aplicado ao controle de sistemas abertos [64–66]. Na verdade, efeitos cooperativos advindos da dissipação foram demonstrados na versão estocástica de sistemas quânticos abertos usando o KM [64]. Além disso, a investigação da equação mestra não local no tempo e não Markoviana por meio do KM mostrou uma implementação de alta fidelidade de uma porta quântica para um qubit, dependendo da correlação de dissipação de controle e dos efeitos de memória relacionados ao ambiente [65].

Aqui, usamos o KM para realizar a preparação de estado a partir de um estado inicial, assim como a implementação de portas quânticas para sistemas de qubits e qutrits. Também investigamos os efeitos de estados de vazamento, que são níveis não



computacionais presentes, por exemplo, em qubits supercondutores [22]. Assumimos que os sistemas seguem uma equação mestra Markoviana com ruído de dephasing e/ou amplitude-damping, que são arquétipos padrão de canais ruidosos [67]. Além disso, usamos duas maneiras alternativas de obter numericamente os controles: (i) otimização na presença de ruído, que chamamos de otimização não unitária, e (ii) otimização na ausência de ruído, que chamamos de otimização unitária. Para a preparação de estado, como era de se esperar, verificamos que a otimização não unitária supera a otimização unitária. No entanto, para a implementação de portas quânticas, observamos que a otimização não unitária nem sempre supera a otimização unitária. Em casos em que todos os estados são levados em consideração sofrendo os efeitos do ruído, a otimização não unitária e a otimização unitária têm essencialmente o mesmo desempenho. Os casos em que a otimização não unitária tem um desempenho melhor do que a otimização unitária são aqueles em que existe vazamento e um subconjunto de estados menos afetado pela dissipação. Para esses casos, a otimização não unitária é mais eficiente porque é possível encontrar um caminho para evitar a dissipação, o que não acontece com a otimização unitária.

## 5.2 Controle Quântico Aplicado a um Sistema Quântico com Dissipação

Para considerar uma dinâmica dissipativa, utilizamos a conhecida equação mestra Markoviana,

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \frac{1}{2} \sum_j \gamma_j \left( 2L_j \rho L_j^\dagger - L_j^\dagger L_j \rho - \rho L_j^\dagger L_j \right), \quad (5.1)$$

onde o primeiro termo no lado direito descreve a evolução unitária e o segundo termo considera a dissipação.  $L_j$  são os operadores de Lindblad e  $\gamma_j$  são as taxas de decaimento correspondentes. O Hamiltoniano nesse caso é  $H = H_0 + \varepsilon_\gamma(t)H_1$ , o qual pode ser dividido em dois termos. O primeiro termo é um Hamiltoniano constante  $H_0$  e o segundo termo é composto pelo produto da função de controle dependente do tempo  $\varepsilon_\gamma(t)$  e o Hamiltoniano  $H_1$ . Como a abordagem de otimização será empregada para cada valor de  $\gamma$ , como detalhado abaixo, a função de controle irá depender da taxa de decaimento.

Os controles otimizados são obtidos numericamente pelo método de Krotov [17]. Este método tem sido empregado para estudar protocolos relacionados à computação quântica usando portas quânticas com grande sucesso [68]. O KM é um método

iterativo monotônico, capaz de encontrar controles otimizados que minimizam um certo funcional dependente das funções de controle e do resultado desejado, similar ao que foi apresentado na seção 2.10. Aqui, empregamos o mesmo funcional adotado na referência [17], que é dado por

$$J_T = 1 - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{w_i}{\text{Tr}[\rho_i^2(0)]} \text{Re} \{ \text{Tr} [O\rho_i(0)O^\dagger\rho_i(T)] \}, \quad (5.2)$$

onde  $w_i$  é um peso para cada estado inicial  $\rho_i(0)$ ,  $O$  é a operação unitária desejada, e  $\rho_i(T)$  corresponde ao  $i$ -ésimo estado inicial evoluído até o tempo final  $T$ . Considerando uma coleção de  $n$  estados iniciais com pesos diferentes, é possível acelerar a convergência do KM[17]. Para obter as equações de controle do KM por meio do cálculo variacional, uma restrição adicional deve ser adicionada,

$$J = J_T + \int_0^T \frac{(\varepsilon_\gamma(t) - \varepsilon_\gamma^{ref}(t))^2}{\lambda S(t)} dt. \quad (5.3)$$

Na equação acima,  $\lambda$  é uma constante positiva,  $\varepsilon_\gamma^{ref}(t)$  é uma função de referência, e  $S(t)$  é a função de envelope. A restrição adicional na Eq. (5.3) minimiza a fluência, que representa a potência integrada transmitida do pulso de controle para o sistema e seu ambiente. Começando com uma função tentativa  $\varepsilon_\gamma^0(t)$ , precisamos resolver um conjunto de equações diferenciais acopladas para encontrar a correção para o campo de controle  $\Delta\varepsilon_\gamma(t)$ . A primeira equação diferencial está relacionada à evolução retroativa (do tempo final  $t = T$  para o tempo inicial  $t = 0$ ) dos coestados  $\phi_i(t)$  através da seguinte equação

$$\frac{\partial\phi_i^k(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H^k, \phi_i^k] - D^\dagger[\phi_i^k], \quad (5.4)$$

onde

$$D^\dagger[\xi] = \frac{1}{2} \sum_j \gamma_j \left( 2L_j^\dagger \xi L_j - L_j^\dagger L_j \xi - \xi L_j^\dagger L_j \right), \quad (5.5)$$

e o índice de subscrito  $i$  está relacionado ao conjunto de estados iniciais que estão sendo otimizados,  $k$  indica a  $k$ -ésima iteração do algoritmo, enquanto  $H^k = H_0 + \varepsilon_\gamma^k(t)H_1$ . A Equação (5.4) é resolvida impondo uma condição ao coestado no tempo final, dada por  $\phi_i^k(t = T) = \frac{w_i}{\text{Tr}[\rho_i^2(0)]} [O\rho_i(0)O^\dagger]$ . Além disso, os estados iniciais  $\rho_i(0)$  são evoluídos para a frente de acordo com a equação mestra,

$$\frac{d\rho_i^{k+1}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H^{k+1}, \rho_i^{k+1}] + D[\rho_i^{k+1}], \quad (5.6)$$

e a correção da função de controle na  $k$ -ésima iteração é

$$\varepsilon_\gamma^{k+1}(t) = \varepsilon_\gamma^k(t) + \lambda S(t) \Delta \varepsilon_\gamma^{k+1}(t) \quad (5.7)$$

onde

$$\Delta \varepsilon_\gamma^{k+1}(t) = \text{Im} \left\{ \sum_{i=0}^{n-1} \text{Tr} \left\{ \phi_i^k(t) [H_1, \rho_i^{k+1}(t)] \right\} \right\}, \quad (5.8)$$

As equações (5.4 – 5.8) são resolvidas de maneira auto-consistentemente e o valor do funcional mostrado na Eq. (5.3) decresce monotonicamente.

### 5.3 Sistemas Simples

Iniciamos nossa investigação da otimização de sistemas quânticos abertos considerando um qubit e um qutrit sujeitos a ruído de dephasing ou amplitude-damping. O Hamiltoniano do qubit é  $H = H_0 + \varepsilon_\gamma(t)H_1$ , onde  $H_0 = -\hbar\omega_0\sigma_z$  e  $H_1 = \hbar\omega_0\sigma_x$ . As matrizes de Pauli para spins nas direções  $z$  e  $x$  são denotadas respectivamente por  $\sigma_z$  e  $\sigma_x$ . Os termos do Hamiltoniano que descrevem o qutrit são

$$H_0 = -\hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5.9)$$

e

$$H_1 = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

Fisicamente, um Hamiltoniano com esse tipo de estrutura pode ser encontrado quando três elétrons estão confinados em pontos quânticos duplos [69, 70] ou em íons aprisionados [71]. Para resolver numericamente as equações (5.4 – 5.8), primeiro precisamos definir alguns parâmetros. Adotamos a escala de tempo  $\tau = \omega_0^{-1}$  e o tempo final de evolução  $T = 10\tau$ . Além disso, o palpite inicial para a função de controle é configurado como  $\varepsilon_\gamma(t) = A_0 S(t)$ , onde  $A_0$  é a amplitude inicial da função de teste e  $S(t)$  é a função de envelope que liga e desliga suavemente a função de

controle, dada por

$$S(t) = \begin{cases} \sin^2(\frac{\pi t}{2t_r}), & \text{se } t \leq t_r \\ 1, & \text{se } t_r < t < T - t_r \\ \sin^2(\frac{\pi(t-T)}{2t_r}), & \text{se } t \geq T - t_r \end{cases} \quad (5.11)$$

Na equação acima, usamos  $A_0 = 10^{-2}$  e  $t_r = T/30$ .

### 5.3.1 Preparação de Estado

Primeiramente, investigamos o controle otimizado considerando o caso em que um estado puro inicial descrito por uma matriz de densidade  $\rho_0(0)$  é usado para preparar um estado final  $\rho_0(T) = O\rho_0(0)O^\dagger$ , onde  $O$  é alguma porta quântica específica. Para o qubit e o qutrit, usamos  $\rho_0(0) = |0\rangle\langle 0|$ , onde  $|0\rangle$  é o estado de nível de energia mais baixo. Tomamos a transformada quântica de Fourier como um exemplo para o operador alvo para ambos qubit e qutrit, que é dado respectivamente por  $O = (\sigma_x + \sigma_z)/\sqrt{2}$  e

$$O = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & e^{2\pi i/3} & e^{4\pi i/3} \\ 1 & e^{4\pi i/3} & e^{8\pi i/3} \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

A transformada quântica de Fourier consiste na aplicação da transformada de Fourier discreta aos componentes de um estado  $|\psi\rangle$  em um sistema quântico. Esta transformação pode ser representada por um operador unitário. No contexto deste capítulo, está sendo empregada como um exemplo adicional de uma transformação unitária.

Encontramos a função de controle otimizada  $\varepsilon_\gamma^{opt}(t)$  para cada taxa de decaimento  $\gamma$ . Aqui, temos um único  $\gamma$  na Eq. (5.1) porque começamos nossa investigação considerando tipos individuais de ruído com a mesma taxa de decaimento. Após obter a função de controle otimizada, realizamos o cálculo da fidelidade, que é dada por

$$F = \langle 0|O^\dagger \rho(T)O|0\rangle, \quad (5.13)$$

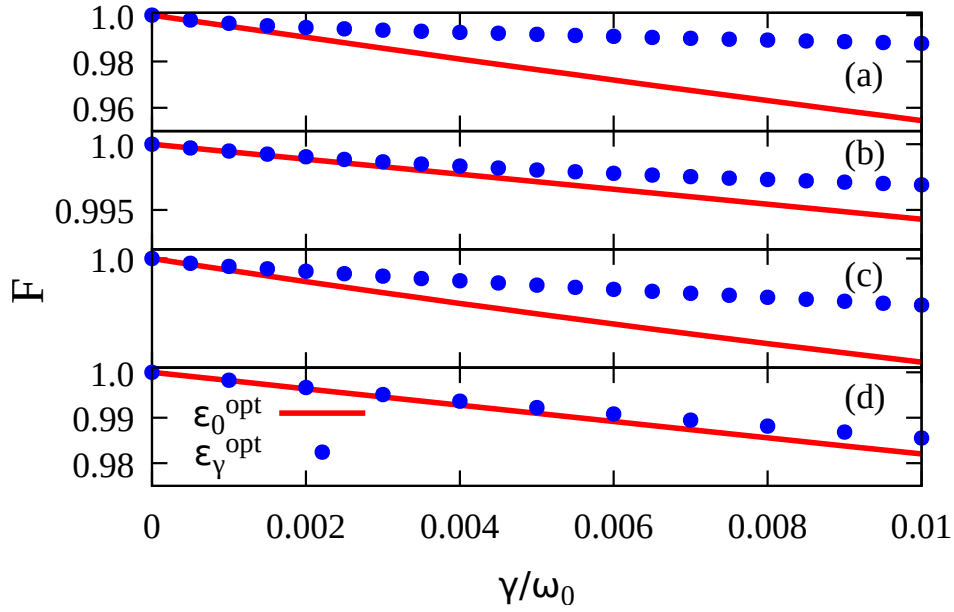
onde  $\rho(T)$  é a solução da Eq. (5.1) no tempo final de evolução  $T$ . Usamos dois operadores de Lindblad individualmente diferentes, relacionados ao canal de dephasing e ao canal de amplitude-damping. Para o qubit, a soma na Eq. (5.1) contém apenas o termo  $j = 1$  e o operador de Lindblad é ou  $L_1 = \sigma_z$  (dephasing) ou  $L_1 = \sigma_-$  (amplitude-damping), onde  $\sigma_- = (\sigma_x - i\sigma_y)/2$ . Para o qutrit, a soma na Eq. (5.1)

contém dois termos  $j = 1, 2$  e os operadores de Lindblad para dephasing são  $L_1 = s_z^1$  e  $L_2 = s_z^2$  enquanto para amplitude-damping são  $L_1 = s_-^1$  e  $L_2 = s_-^2$ , onde  $s_z^1 = |1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 0|$ ,  $s_z^2 = |2\rangle\langle 2| - |0\rangle\langle 0|$ ,  $s_-^1 = |1\rangle\langle 0|$ , e  $s_-^2 = |2\rangle\langle 0|$ .

Na figura 5.1, plotamos a fidelidade para o dephasing (painéis (a) e (c)) e o amplitude-damping (painéis (b) e (d)) como função da taxa de decaimento  $\gamma$  para um qubit e um qutrit. As curvas sólidas vermelhas são obtidas pelos seguintes passos: (i) encontrar o campo otimizado  $\varepsilon_0^{opt}(t)$  para  $\gamma = 0$ ; (ii) inserir esse campo otimizado  $\varepsilon_0^{opt}(t)$  na Eq. (5.1) para cada valor de  $\gamma$ ; (iii) usar a matriz de densidade evoluída no tempo final para avaliar a fidelidade da Eq. (5.13). As curvas pontilhadas azuis, avaliadas para os campos otimizados  $\varepsilon_\gamma^{opt}(t)$ , são obtidas para o valor correspondente de  $\gamma$ , como explicado na seção 5.2. Para um sistema qubit e qutrit, a fidelidade obtida para a função otimizada  $\varepsilon_\gamma^{opt}(t)$  avaliada para cada valor de  $\gamma$  é maior do que a fidelidade calculada com a função otimizada unitária  $\varepsilon_0^{opt}(t)$ , como esperado. Para  $\gamma/\omega_0 = 0.01$ , a fidelidade para um qubit considerando a função de controle obtida da otimização não-unitária é 3.5% e 0.26% maior do que aquela obtida com a otimização unitária, respectivamente, para os erros de dephasing (painel (a)) e amplitude-damping (painel (b)). Para um qutrit, a fidelidade é 7% (dephasing) e 0.35% (amplitude-damping) maior quando a dinâmica é calculada com a função de controle obtida da otimização não-unitária e  $\gamma/\omega_0 = 0.01$ . Com base nos resultados da figura 5.1, concluímos que a otimização não-unitária é mais bem-sucedida na preparação de um estado desejado para ambos os sistemas qubit e qutrit; especialmente, para o qutrit submetido ao dephasing (veja o painel (c) da figura 1).

Esses resultados naturalmente levantam a questão de qual seria a origem física da diferença observada entre a otimização realizada com e sem a presença de ruído ambiental. Na otimização unitária, o controle otimizado para a preparação do estado é obtido dentro da evolução unitária no espaço de Hilbert correspondente. Com as condições de controlabilidade sendo atendidas, os controles otimizados são capazes de atingir os rendimentos mais altos possíveis. Na verdade, a solução para o problema de controle ótimo não é única: há uma miríade de controles otimizados levando ao alvo com rendimentos correspondentes de alta fidelidade. Diferentes controles otimizados unitariamente podem levar a valores distintos da fidelidade final da dinâmica ruidosa correspondente, mas a otimização unitária não pode distinguir nenhuma diferença entre os controles otimizados *a priori*.

Na presença de ruído, a dinâmica não unitária do sistema ocorre no espaço de Liouville associado (ou equivalentemente em um espaço de Hilbert de dimensão superior). Assim, um controle obtido unitariamente, em geral, não pode mais direcionar o sistema arbitrariamente próximo ao alvo, uma vez que o espaço de estados e a



**Figura 5.1:** Fidelidade avaliada pela Eq. (5.13) para um qubit considerando erros de dephasing (painel (a)) e amplitude-damping (painel (b)) em função da taxa de decaimento  $\gamma$  usando a função de controle otimizada obtida da dinâmica unitária (curva sólida vermelho) e não-unitária (curva pontilhada azul). Os resultados correspondentes para um qutrit são mostrados no painel (c) (dephasing) e no painel (d) (amplitude-damping).

dinâmica mudaram em comparação com o caso unitário. No caso da otimização não unitária, o algoritmo de otimização leva em consideração a estrutura não unitária do espaço de Liouville, e assim pode aprimorar o desempenho da otimização unitária, selecionando os controles cuja dinâmica é menos afetada pelo ruído. Para apoiar esse raciocínio, verificamos numericamente para os casos e para a faixa de valores de dissipação considerada aqui, que os controles obtidos da otimização não unitária são controles otimizados também para a evolução unitária associada. A seguir, mostramos que essa vantagem da otimização não unitária essencialmente desaparece para a implementação de portas quânticas quando não há estados de vazamento ou quando todos os níveis são afetados de maneira semelhante pelo ruído.

### 5.3.2 Porta Quântica

Consideramos o desempenho das funções de controle otimizadas quando uma porta quântica é o objetivo da otimização. Essa situação é mais sutil porque a porta quântica deve operar sobre um estado inicial desconhecido. Para contornar essa situação, a otimização deve levar em consideração um conjunto de estados iniciais (para detalhes, consulte a Ref. [17]). Para qubits, empregamos os três estados iniciais

descritos nas Refs. [72, 73], cujos elementos da matriz são dados por

$$\begin{aligned}\rho_j(0) &= |j\rangle\langle j| \text{ para } j=0,1 \\ \rho_2(0) &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} |i\rangle\langle j|.\end{aligned}\tag{5.14}$$

Para qutrits, usamos os seguintes quatro estados iniciais [70],

$$\begin{aligned}\rho_j(0) &= |j\rangle\langle j| \text{ para } j=0,1,2 \\ \rho_3(0) &= \frac{1}{3} \sum_{i,j} |i\rangle\langle j|.\end{aligned}\tag{5.15}$$

Os pesos na Eq. (5.2) são assumidos como  $w_j = 1/\mathcal{N}$  (a menos que seja especificado), onde  $\mathcal{N} = 3$  para o qubit e  $\mathcal{N} = 4$  para o qutrit. Como primeira medida de desempenho das funções de controle, utilizamos a fidelidade média apenas sobre os estados iniciais, definida como

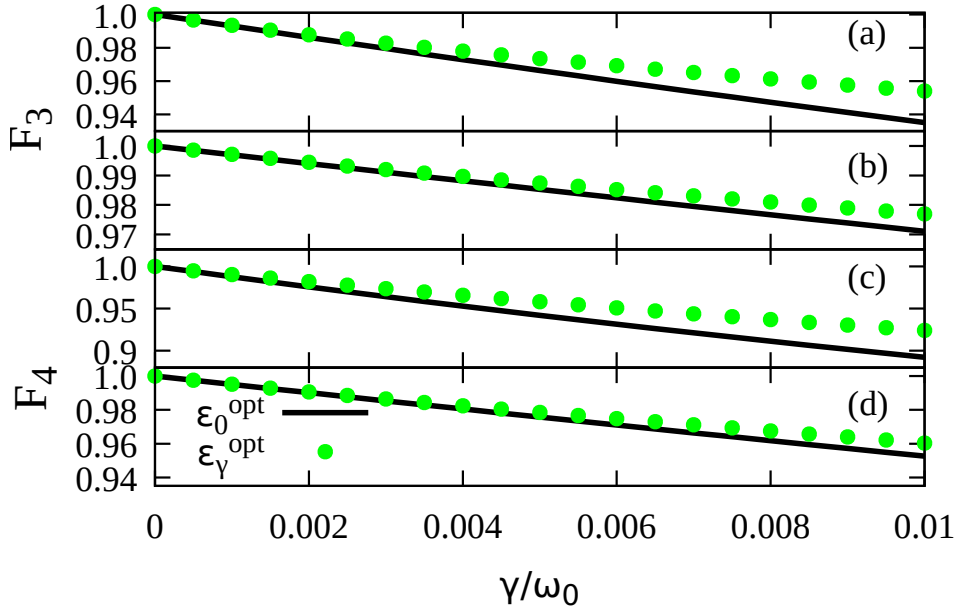
$$F_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left\{ \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\sigma} \rho_i(T) \sqrt{\sigma}} \right\}^2,\tag{5.16}$$

onde  $\sigma = O\rho_i(0)O^\dagger$ ,  $i$  refere-se a estados iniciais dados por Eq. (5.14) ou Eq. (5.15), e  $n$  é o número correspondente de estados iniciais.

A figura 5.2 mostra a fidelidade média ao longo dos estados iniciais para o dephasing (painéis (a) e (c)) e amplitude-damping (painéis (b) e (d)) em função da taxa de decaimento  $\gamma$ , respectivamente, para o qubit e o qutrit. As curvas sólidas pretas são obtidas para  $\varepsilon_0^{opt}(t)$  evoluindo a Eq. (5.1) com o conjunto de estados iniciais para o qubit Eq. (5.14) e para o qutrit Eq. (5.15). As matrizes de densidade evoluídas são usadas para avaliar a fidelidade média de Eq. (5.16) para cada valor de  $\gamma$ . As curvas pontilhadas verdes na figura 5.2 são avaliadas de maneira semelhante, mas a função  $\varepsilon_\gamma^{opt}(t)$  é otimizada para cada valor de  $\gamma$ . Na figura 5.2, pode-se ver que a fidelidade média obtida para a otimização não unitária supera a otimização unitária, o que mostra numericamente que o KM está aprimorando o controle não unitário para alcançar uma maior fidelidade para o conjunto de estados iniciais.

Para avaliar o desempenho de uma função de controle na implementação de uma porta quântica, podemos usar a fidelidade média  $F_m$  em um conjunto mais abrangente de estados iniciais

$$F_m = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \langle \varphi_i | O^\dagger \rho(T) O | \varphi_i \rangle,\tag{5.17}$$



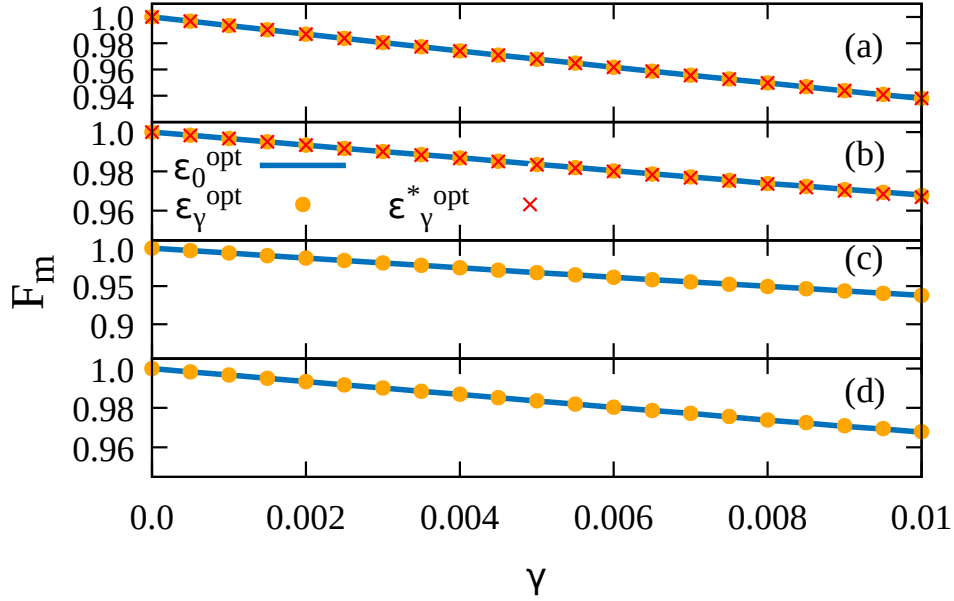
**Figura 5.2:** Fidelidade de três estados avaliada por Eq. (5.16) para um qubit considerando dephasing (painel (a)) e amplitude-damping (painel (b)) em função da taxa de decaimento  $\gamma$ , usando a função de controle otimizada obtida da dinâmica unitária (curva sólida preta) e não unitária (curva pontilhada verde). Os resultados correspondentes para um qutrit, onde a fidelidade de quatro estados é avaliada por Eq. (5.16) considerando dephasing e amplitude-damping, são mostrados nos painéis (c) e (d), respectivamente.

onde os estados  $|\varphi_i\rangle$  são gerados aleatoriamente. O conjunto de matrizes puras aleatórias  $|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$  é construído de maneira que todos os estados se distribuam uniformemente de acordo com a norma de Hilbert-Schmidt [74].

Na figura 5.3, são apresentadas as fidelidades médias para dephasing (painéis (a) e (c)) e amplitude-damping (painéis (b) e (d)) em função da taxa de decaimento  $\gamma$ . As curvas sólidas de azuis são obtidas para  $\varepsilon_0^{opt}(t)$  e evoluindo a Eq. (5.1) com o conjunto de estados iniciais para o qubit dado por Eq. (5.14) e para o qutrit dado por Eq. (5.15). As matrizes de densidade evoluídas são usadas para avaliar a fidelidade média da Eq. (5.17) para cada valor de  $\gamma$ . As curvas pontilhadas laranjas na figura 5.3 são avaliadas de maneira semelhante, mas considerando a função  $\varepsilon_\gamma^{opt}(t)$ , que é otimizada para cada valor de  $\gamma$ . Pode-se observar que a fidelidade média obtida para as funções de controle unitárias e não unitárias, considerando ambos os tipos de erros, são essencialmente as mesmas, embora as funções de controle otimizadas sejam distintas para diferentes valores da taxa de decaimento (veja figura 5.4).

Para o qubit, também adicionamos um resultado para a fidelidade média considerando diferentes estados iniciais propostos em Ref. [17], os quais são dados por  $\rho_0(0) = 2/3|0\rangle\langle 0| + 1/3|1\rangle\langle 1|$ ,  $\rho_1(0) = 1/2(|0\rangle + |1\rangle)(\langle 0| + \langle 1|)$  e  $\rho_2(0) = 1/2|0\rangle\langle 0| + 1/2|1\rangle\langle 1|$ . Para este caso, utilizamos os pesos na Eq. (5.2) como  $w_0 = 8w_1$  e  $w_1 = w_2$ . A



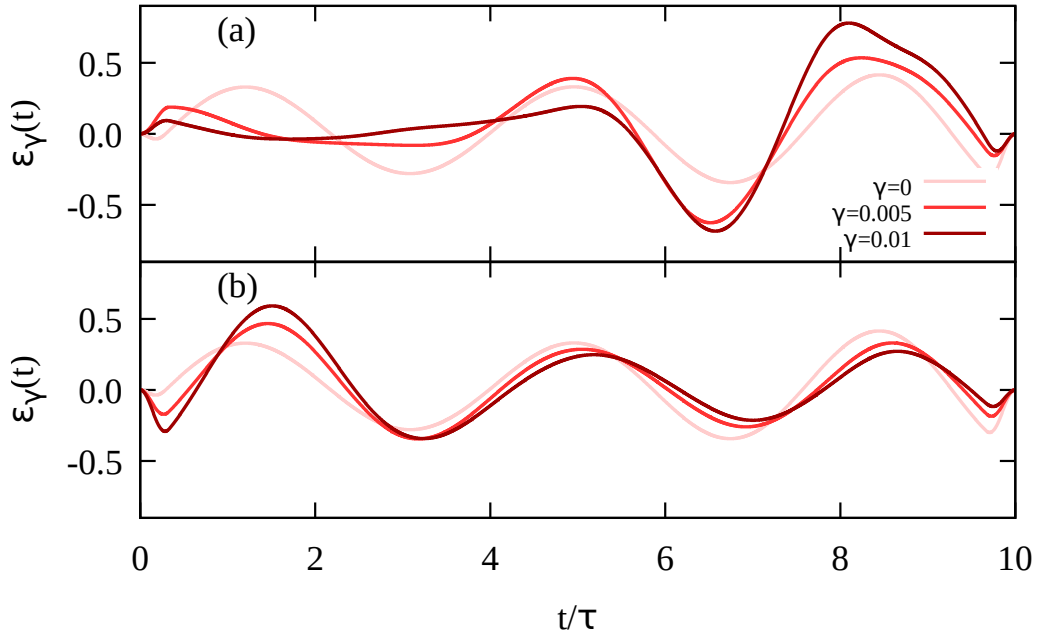


**Figura 5.3:** Fidelidade média avaliada pela Eq. (5.17), respectivamente para um qubit considerando dephasing (painéis (a)) e amplitude-damping (painéis (b)) em função da taxa de decaimento  $\gamma$ , usando a função de controle otimizada obtida da dinâmica unitária (curva sólida azul) e não unitária (curva pontilhada laranja). As cruces vermelhas indicam a fidelidade média considerando um conjunto diferente de estados iniciais apenas para o caso do qubit, conforme proposto em Ref. [17]. Da mesma forma para o qutrit, a fidelidade média é mostrada no painel (c) (dephasing) e no painel (d) (amplitude-damping).

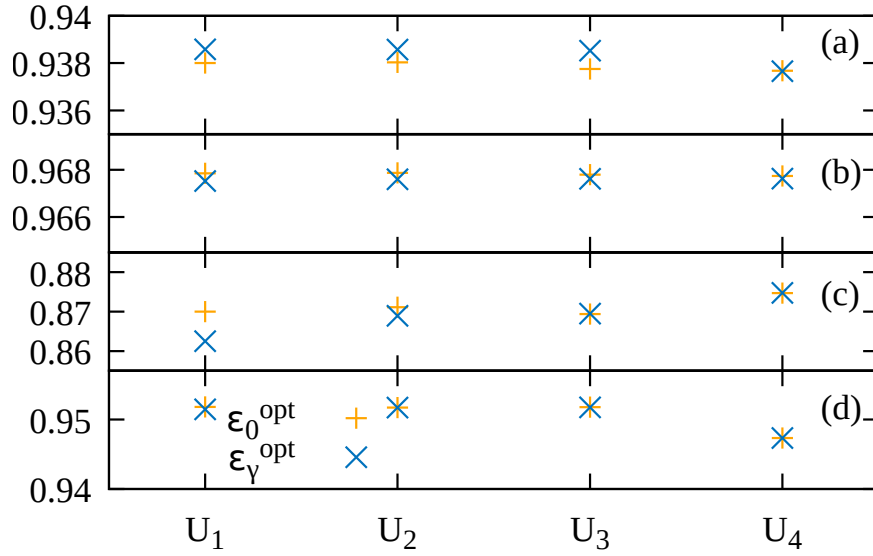
fidelidade média avaliada para a função de controle não unitária  $\varepsilon_\gamma^{*opt}(t)$ , considerando esses estados iniciais, também é mostrada na figura 5.3 pelas cruces vermelhas, mas observa-se que o resultado para a fidelidade média é muito semelhante ao encontrado considerando  $\varepsilon_0^{opt}(t)$ .

Para investigar ainda mais este cenário, consideramos quatro tipos diferentes de portas quânticas e avaliamos a fidelidade média considerando  $\gamma/\omega_0 = 0.01$ . Tais resultados são mostrados na figura 5.5. Nas subfiguras (a) e (b) da figura 5.5, plotamos a fidelidade média para qubits considerando as seguintes portas quânticas:  $U_1 = \sigma_x$ ,  $U_2 = \sigma_y$ ,  $U_3 = \sigma_z$ , e  $U_4 = \pi/8 = |0\rangle\langle 0| + e^{i\pi/4}|1\rangle\langle 1|$ .

Quando o canal dephasing é considerado (figura 5.5(a)), a fidelidade média avaliada com o controle não unitário é maior do que aquela avaliada com o controle unitário para as portas  $U_1$ ,  $U_2$  e  $U_3$ , mas o ganho é muito pequeno, da ordem de 0.05%. Por outro lado, a otimização não unitária fornece uma fidelidade média menor para o canal amplitude-damping (painel (b) da figura 5.5). Acreditamos que essa pequena diferença entre a otimização unitária e não unitária vista na figura 5.5 seja causada pelos cálculos numéricos envolvidos no Método de Krotov (KM) e na avaliação média da Eq. (5.17), que considera  $N_s = 12^4$  estados iniciais aleatórios. Para qutrits,



**Figura 5.4:** Funções de controle otimizadas obtidas para a implementação de uma porta quântica para um qubit considerando dephasing (painel (a)) e amplitude-damping (painel (b)) para diferentes valores da taxa de decaimento  $\gamma$ .



**Figura 5.5:** Os painéis (a) e (c) referem-se ao erro de dephasing, enquanto os painéis (b) e (d) referem-se ao erro de amplitude-damping, respectivamente, para o qubit e o qutrit. Os resultados para a fidelidade média para um valor fixo da taxa de decaimento  $\gamma/\omega_0 = 0.01$ , considerando as portas quânticas  $U_1$ ,  $U_2$ ,  $U_3$ , e  $U_4$ , usando a função de controle otimizada obtida a partir da dinâmica unitária (símbolos laranja) e dinâmica não unitária (símbolos azuis).

usamos as seguintes portas quânticas [71]:

$$U_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -e^{-2\pi i/3} & 0 \\ -e^{2\pi i/3} & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (5.18)$$

$$U_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & ie^{2\pi i/3} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ ie^{-2\pi i/3} & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.19)$$

$$U_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} & ie^{-\pi i/6} \\ 0 & ie^{\pi i/6} & -\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (5.20)$$

$$U_4 = \begin{pmatrix} e^{\pi i/3} & 0 & 0 \\ 0 & e^{\pi i/6} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\pi i/2} \end{pmatrix}. \quad (5.21)$$

Para realizar essas otimizações, usamos o mesmo Hamiltoniano descrito na equação (5.9), mas temos que alterar  $H_1$  na equação (5.10) a fim de implementar as portas acima para o qutrit. Basicamente, usamos os elementos da matriz de  $H_1$  iguais a um na mesma posição em que a porta quântica (equações (5.18 – 5.21)) tem um elemento de matriz diferente de zero. Em ambos os painéis (c) e (d) da figura 5.5, podemos observar que as otimizações não unitárias e unitárias apresentam um valor quase idêntico para a fidelidade média.

Esses resultados mostram que a função de controle otimizada unitariamente  $\varepsilon_0^{opt}(t)$  é uma solução muito próxima da solução ideal para implementar uma porta quântica para sistemas quânticos abertos descritos pela equação mestra markoviana na Eq. (5.1). Atribuímos esse fato à restrição de que o campo de controle seja capaz de otimizar a fidelidade da porta para todos os estados iniciais possíveis. A partir da evolução desses estados, é assim impossível evitar as regiões do espaço de Hilbert que são mais fortemente afetadas pelo ruído. Portanto, o algoritmo de otimização não unitária apenas procura uma solução para atingir o respectivo conjunto de estados alvo, e todos os outros caminhos funcionam igualmente bem em média, quando comparados à otimização unitária.

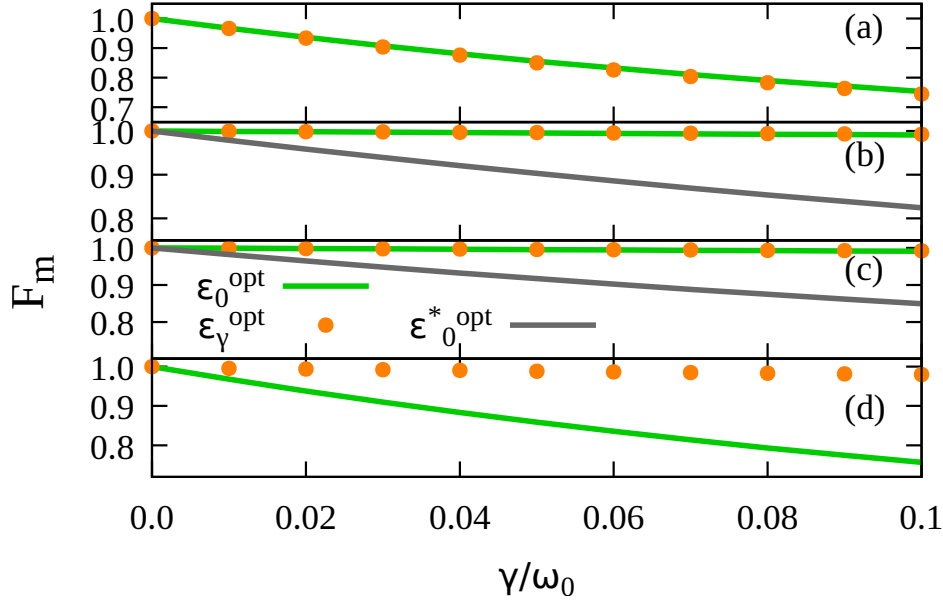
## 5.4 Efeitos de vazamento

Para investigar ainda mais o papel das soluções otimizadas unitárias e não unitárias, analisamos um sistema que contém níveis não computacionais, também conhecidos como estados de vazamento. Comparamos um sistema de dois qubits, contendo apenas estados computacionais, a um sistema de quatro níveis que contém apenas dois estados computacionais. Podemos descrever esses dois sistemas pelo mesmo Hamiltoniano, que pode ser escrito na base do sistema de dois qubits como

$$\begin{aligned}
 H &= \hbar (J_1 \sigma_z^{(1)} + J_2 \sigma_z^{(2)} + J_{12} \sigma_z^{(1)} \sigma_z^{(2)}) \\
 &+ \hbar \varepsilon_\gamma(t) (\sigma_x^{(1)} + \sigma_x^{(2)}),
 \end{aligned} \tag{5.22}$$

onde  $\sigma_m^{(j)}$  é a matriz de Pauli na direção  $m$  agindo no  $j$ -ésimo qubit,  $J_1$ ,  $J_2$  e  $J_{12}$  são parâmetros que descrevem o termo independente do tempo de  $H_0$ . A correspondência entre os estados dos sistemas de dois qubits e quatro níveis é dada por:  $|0\rangle \leftrightarrow |00\rangle$ ,  $|1\rangle \leftrightarrow |01\rangle$ ,  $|2\rangle \leftrightarrow |10\rangle$  e  $|3\rangle \leftrightarrow |11\rangle$ .

O sistema de dois qubits é assumido como o sistema livre de efeitos de vazamento, enquanto o sistema de quatro níveis apresenta efeitos de vazamento devido à ação da porta quântica apenas nos dois níveis de energia mais baixos. Essa diferença pode ser esclarecida pelos seguintes argumentos. Primeiro, tratamos de uma porta X aplicada ao primeiro qubit. No sistema de dois qubits, essa porta é descrita pelo operador  $O = \sigma_x^{(1)}$ , enquanto que a porta X é aplicada aos dois níveis de energia mais baixos no sistema de quatro níveis, portanto  $O = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|$ . Além disso, o conjunto de estados usado na otimização da porta quântica é distinto. Para o sistema de dois qubits, devemos usar o conjunto  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle, |\Phi\rangle\}$ , onde  $|\Phi\rangle = (|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)/2$ . Este conjunto é necessário porque a porta quântica atua em ambos os qubits, através da porta X no primeiro qubit e da identidade no segundo qubit. No sistema de quatro níveis, a porta X atua apenas nos dois níveis de energia mais baixos, portanto, o conjunto apropriado de estados iniciais é semelhante ao sistema de um qubit  $\{|0\rangle, |1\rangle, |\Phi\rangle\}$ , onde  $|\Phi\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ . Outra diferença entre esses dois sistemas aparece no cálculo da fidelidade média. Os estados iniciais aleatórios para o sistema de quatro níveis são dados por  $|\varphi_i\rangle = \alpha_i|0\rangle + \beta_i|1\rangle$ , onde  $|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2 = 1$  e  $\alpha_i, \beta_i$  são números complexos aleatórios que seguem a distribuição normal. Nesse caso, a porta quântica atua apenas no subespaço computacional relativo aos níveis  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  e nenhuma restrição é imposta aos níveis  $\{|2\rangle, |3\rangle\}$ . Para o sistema de dois qubits, a fidelidade média é avaliada usando os estados iniciais aleatórios  $|\varphi_i\rangle = \alpha_i|00\rangle + \beta_i|01\rangle + \gamma_i|10\rangle + \delta_i|11\rangle$ , onde  $|\alpha_i|^2 + |\beta_i|^2 + |\gamma_i|^2 + |\delta_i|^2 = 1$  e  $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$  e  $\delta_i$  são números complexos aleatórios ordenados de acordo com a distribuição

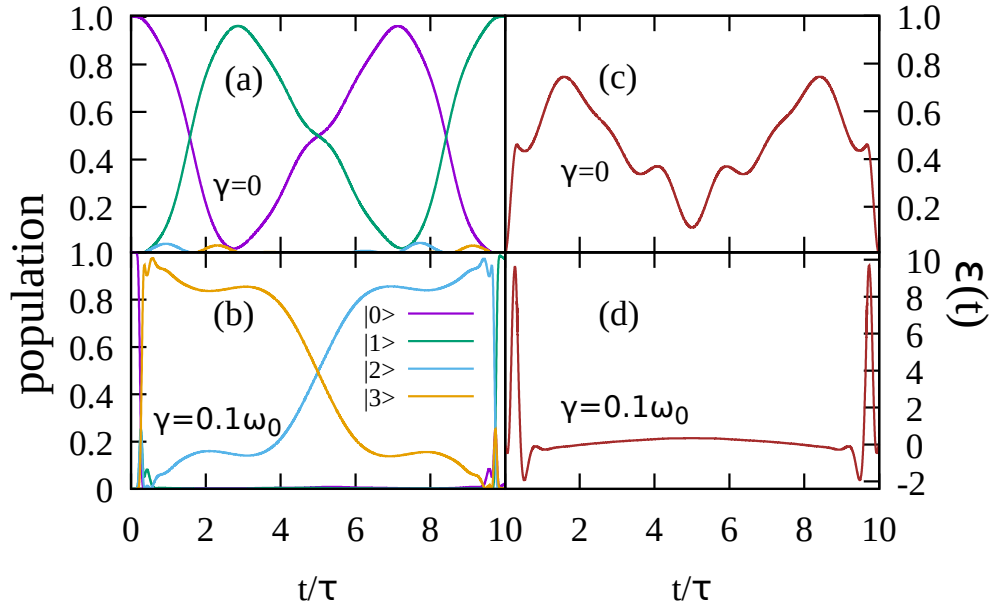


**Figura 5.6:** A fidelidade média avaliada pela Eq. (5.17) para estados de quatro níveis como função da taxa de decaimento  $\gamma$ , utilizando a função de controle otimizada obtida a partir da dinâmica unitária (curvas sólidas verdes) e dinâmica não unitária (pontos laranja). Os painéis (a) a (d) correspondem aos casos (i) a (iv) das combinações dos operadores de Lindblad. As curvas sólidas cinzas nos painéis (b) e (c) representam a fidelidade média considerando uma função de controle de teste diferente, na qual a função na Eq. (5.11) é multiplicada por  $\sin(\omega_{i,0}t)$ , onde  $\omega_{i,0}$  é a frequência de Bohr associada aos estados  $|0\rangle$  e  $|i\rangle$ , com  $i = 3$  e  $2$ , respectivamente.

normal [74]. Nesse caso, todos os estados são necessários porque a porta quântica atua em ambos os qubits simultaneamente.

Também exploramos diferentes tipos de dissipação para extrair mais informações sobre a validade da equivalência entre a otimização unitária e não unitária. Os casos testados correspondem aos seguintes operadores de Lindblad que devem ser inseridos na Eq. (5.1): (i)  $L_1 = |0\rangle\langle 1|$ ,  $L_2 = |0\rangle\langle 2|$ , e  $L_3 = |0\rangle\langle 3|$ , (ii)  $L_1 = |0\rangle\langle 1|$  e  $L_2 = |0\rangle\langle 2|$ , (iii)  $L_1 = |0\rangle\langle 2|$  e  $L_2 = |0\rangle\langle 3|$ , (iv)  $L_1 = |0\rangle\langle 1|$ . Quando há mais de um operador de Lindblad, usamos a mesma taxa de decaimento. Para quebrar a degenerescência entre os estados  $|1\rangle$  e  $|2\rangle$ , utilizamos  $J_1/\omega_0 = -2$  e  $J_2/\omega_0 = -0.2$ . O acoplamento entre os qubits é  $J_{12}/\omega_0 = 0.1$ , onde  $\omega_0 = \tau^{-1}$ , e o tempo final é  $T = 10\tau$ . Outros parâmetros não mencionados explicitamente aqui são os mesmos usados na subseção 5.3.2.

Os casos (i) a (iv) com os operadores de Lindblad mencionados acima proporcionam uma média de fidelidade quase idêntica (resultados não mostrados aqui) considerando a otimização unitária e não unitária para o sistema de dois qubits. Esses resultados decorrem da necessidade de considerar todos os estados do espaço de Hilbert, o que não deixa margem para evitar a dissipação. Nos painéis (a) a (d) da figura 5.6,



**Figura 5.7:** População do sistema de quatro níveis sob a dissipação descrita pelo operador de Lindblad  $L_1 = |0\rangle\langle 1|$  é mostrada nos painéis (a) e (b) em função do tempo para  $\gamma = 0$  e  $\gamma/\omega_0 = 0.1\omega_0$ , respectivamente. Os painéis (c) e (d) mostram os campos otimizados para a otimização unitária e não unitária, respectivamente.

plotamos a média de fidelidade para o sistema de quatro níveis em função da taxa de decaimento  $\gamma$ , considerando os casos (i) a (iv), respectivamente. As curvas sólidas verdes mostram a média de fidelidade para a função de controle otimizada obtida a partir da otimização unitária, enquanto as curvas pontilhadas laranjas são relativas à otimização não unitária. Podemos ver que os resultados do painel (a) corroboram nossos resultados anteriores sobre a média de fidelidade em portas quânticas, onde as otimizações não unitárias e unitárias proporcionam uma média de fidelidade semelhante. Por outro lado, os painéis (b) a (d) mostram que a otimização não unitária proporciona uma média de fidelidade mais alta do que a otimização unitária, quando a função de teste é escolhida adequadamente. Por exemplo, nos painéis (b) e (c), a diferença entre a média de fidelidade obtida por meio da otimização não unitária e da otimização unitária é bastante pequena quando a função de teste é proporcional à Equação (5.11), mas é muito mais evidente quando a função de envelope da Equação (5.11) é multiplicada por  $\sin(\omega_{i,0}t)$ , onde  $\omega_{i,0}$  é a frequência de Bohr associada aos estados  $|0\rangle$  e  $|i\rangle$ , onde  $i = 3$  e  $2$ , respectivamente. Essas últimas funções de teste são escolhidas para ter a frequência em ressonância com a transição entre o estado  $|0\rangle$  e o estado  $|i\rangle$ , que é um estado que apresenta decaimento. Em outras palavras, quando escolhermos uma função de teste que induz a população dos estados dissipativos, a otimização unitária gera uma função de controle que realiza a porta quântica com sucesso para  $\gamma = 0$  sem evitar os estados dissipativos. Por outro lado, a otimização não unitária gera um controle que implementa a porta

quântica e evita a dissipação tanto quanto possível para maximizar a fidelidade, independentemente da função de teste.

Os resultados da figura 5.6 podem ser melhor compreendidos pela análise da figura 5.7, que mostra a dinâmica populacional correspondente nos painéis (a) e (b) avaliados para  $\gamma = 0$  e  $\gamma/\omega_0 = 0.1$ , respectivamente, para o caso (iv). O estado inicial é  $|0\rangle$  e o estado alvo é  $|1\rangle$ . O campo de controle otimizado (painel (c)) para  $\gamma = 0$  conduz o sistema do estado inicial para o estado alvo, mas principalmente popula os estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ . Quando  $\gamma/\omega_0 = 0.1$ , a otimização não unitária procura um campo de controle otimizado (painel (d)) que tenta evitar o estado dissipativo  $|1\rangle$ , simulado pelo operador de Lindblad  $L_1 = |0\rangle\langle 1|$ , que causa o decaimento da população do estado  $|1\rangle$  para  $|0\rangle$ . Nessa situação, a otimização direciona a dinâmica para um caminho que evita o estado  $|1\rangle$  tanto quanto possível.

Outras situações que poderiam ser investigadas para o sistema de quatro níveis são os casos em que as taxas de decaimento entre diferentes estados são diferentes. Essas situações podem ser compreendidas pela inspeção dos casos acima. Por exemplo, os casos (ii) a (iv) são casos limites do caso (i), com algumas taxas de decaimento ajustadas para zero. Além disso, se o caso (ii)  $L_1 = |0\rangle\langle 1|$  e  $L_2 = |0\rangle\langle 2|$  fosse considerado com diferentes taxas de decaimento  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  em Eq. (5.1), esperamos uma maior fidelidade média para  $\gamma_1 > \gamma_2$  em comparação com o caso em que  $\gamma_1 = \gamma_2$  para um valor fixo de  $\gamma_1$ . A situação limite é aquela em que  $\gamma_2 = 0$ , que apresenta a maior diferença entre a otimização unitária e não unitária, como pode ser visto na figura 5.6 (d).

## 5.5 Conclusão

Neste capítulo, utilizamos o KM para sistemas quânticos abertos e fechados para investigar numericamente a preparação de estados e a implementação de portas quânticas para diversos sistemas de qubits e qutrits. Para a preparação de estados, constatamos que a otimização não unitária apresenta melhor desempenho em comparação com a otimização unitária. Para a implementação de portas quânticas, por outro lado, a otimização unitária e não unitária resulta em uma fidelidade média quase idêntica quando os efeitos de vazamento não são levados em consideração.

Nossos cálculos mostraram que, para a preparação de estados, o resultado da otimização não unitária escolhe um controle otimizado a partir do conjunto de controles otimizados da dinâmica unitária correspondente, que tem um desempenho melhor

na presença de ruído ambiental. Em outras palavras, a otimização não unitária escolhe um caminho dentro da dinâmica que é menos afetado pelo ruído. Para a implementação da porta quântica, por outro lado, a função de controle precisa operar sobre todos os estados ao mesmo tempo, uma vez que a porta quântica deve agir sobre estados de entrada arbitrários. Assim, a otimização não unitária não é mais capaz de evitar partes do espaço de Hilbert que sofrem uma influência maior do ruído. Quando os estados de vazamento são considerados, a otimização não unitária é capaz de apresentar um desempenho melhor do que a otimização unitária. Esse fato está relacionado à existência de um subconjunto de estados correspondentes ao subespaço não computacional que tem pequenas taxas de decaimento, o que abre um caminho capaz de minimizar os efeitos dissipativos. Portanto, a inclusão de estados de vazamento com diferentes taxas de decaimento desempenha um papel fundamental na otimização não unitária, especialmente ao lidar com a implementação de portas quânticas.



# Conclusão

A presente tese aborda questões importantes na computação quântica, explorando temas variados que abrangem controle ótimo, computação quântica com dissipação e protocolos de teletransporte adiabático. Primeiramente, no capítulo 2, fizemos uma revisão dos conceitos básicos relacionados com os temas desenvolvidos na presente tese, que vão desde qubits à teoria de controle quântico ótimo. No capítulo 3, investigamos a robustez de esquemas de otimização considerando campos de controle com amplitudes limitadas sem efeitos dissipativos. Desse modo, descobrimos a solução ótima chamada de “double-bang”, que se destaca ao considerar duas funções de controle independentes que devem ser colocadas no seu valor máximo durante toda a evolução temporal, se o tempo final da evolução for menor que o tempo mínimo. No capítulo 4, focado no estudo de protocolos de computação quântica adiabática, revelou que o uso do método de Krotov para sistemas quânticos abertos oferece vantagens notáveis, especialmente no protocolo de emaranhamento adiabático. No contexto do teletransporte quântico adiabático, identificamos a influência positiva da inclusão de termos extras no Hamiltoniano, fornecendo melhorias significativas na fidelidade. Este estudo sugere que a combinação do método de Krotov para sistemas quânticos abertos com a busca de termos adicionais pode ser uma abordagem valiosa para aplicações reais. No capítulo 5, utilizamos o método de Krotov para controlar sistemas quânticos afetados pelo ruído do ambiente, destacando a superioridade da otimização não unitária na preparação de estados. A otimização não unitária é realizada para cada valor distinto da taxa de decaimento. Por outro lado, a otimização unitária, que só considera o sistema sem dissipação, demonstrou eficácia comparável à otimização não unitária na implementação de portas quânticas. Concluímos que, em determinadas situações, a otimização não unitária revelou-se mais eficaz na preparação de estados, proporcionando soluções robustas em ambientes afetados por ruído. No entanto, a otimização unitária continua sendo preferível em algumas aplicações práticas, indicando a necessidade contínua de aprimoramentos nas estratégias de otimização não unitária.

Esses resultados contribuem para o avanço das técnicas de computação quântica,

oferecendo perspectivas para a implementação prática de algoritmos em dispositivos NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) e promovendo insights cruciais para o desenvolvimento de futuros computadores quânticos universais. A busca por soluções eficientes em ambientes com ruídos permanece um desafio relevante, e as descobertas desta tese abrem caminho para novas investigações e desenvolvimentos nesta emocionante área da mecânica quântica.

# Apêndice A

## Notas sobre bra kets

A seguir destacamos algumas relações com uso da notação de Dirac.

$$A|\varphi\rangle = |A\varphi\rangle \quad (\text{A.1})$$

$$\langle\varphi|A = \langle A^\dagger\varphi| \quad (\text{A.2})$$

$$\langle A\varphi| = \langle\varphi|A^\dagger \quad (\text{A.3})$$

$$\langle\lambda\varphi| = \lambda^*\langle\varphi| \quad (\text{A.4})$$

$$(\langle\varphi|A)|\psi\rangle = \langle\varphi|(A|\psi\rangle) \quad (\text{A.5})$$

A expressão  $\langle A\psi|$  significa: atue o operador  $A$  no ket  $|\psi\rangle$  e encontre o correspondente dual, ou, no espaço das funções de onda, atue  $A$  sobre  $\psi(x)$  e tome o conjugado complexo.

$$\langle A^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|A\psi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle \quad (\text{A.6})$$

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int dx \varphi^*\psi \quad (\text{A.7})$$

$$\langle A\varphi|\psi\rangle = \int dx (A\varphi)^*\psi \quad (\text{A.8})$$

Derivada parcial em relação ao tempo de um produto interno

$$\begin{aligned}
\partial_t \langle \varphi | \psi \rangle &= \partial_t \int dx \varphi^* \psi \\
&= \int dx \partial_t (\varphi^* \psi) \\
&= \int dx (\partial_t \varphi^*) \psi + \int dx \varphi^* (\partial_t \psi) \\
&= \int dx (\partial_t \varphi)^* \psi + \int dx \varphi^* (\partial_t \psi) \\
\partial_t \langle \varphi | \psi \rangle &= \langle \partial_t \varphi | \psi \rangle + \langle \varphi | \partial_t \psi \rangle
\end{aligned} \tag{A.9}$$

Enquanto um operador  $A$  se ajusta como  $A^\dagger$  para entrar no bra, o mesmo não ocorre com  $\partial_t$  em  $\langle \varphi | \partial_t | \psi \rangle$ , precisamos fazer a integração por partes. Utilizando (A.9)

$$\begin{aligned}
\int dt \langle \varphi | \partial_t | \psi \rangle &= \int dt (\partial_t \langle \varphi | \psi \rangle - \langle \partial_t \varphi | \psi \rangle) \\
&= \langle \varphi | \psi \rangle \Big|_{t_1}^{t_2} - \int dt \langle \partial_t \varphi | \psi \rangle
\end{aligned} \tag{A.10}$$

# Bibliografia

- [1] Michael Riordan e Lillian Hoddeson. *Crystal Fire: The Birth of the Information Age*. W. W. Norton & Company, 1997 (ver p. 15).
- [2] George Dyson. *Turing's Cathedral: The Origins of the Digital Universe*. Vintage, 2012 (ver p. 15).
- [3] Michael A. Nielsen e Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2010 (ver pp. 15, 35).
- [4] Alán Aspuru-Guzik e Peter J. Love. “The quest for a scalable quantum computer”. Em: *Nature* 556.7701 (2018), pp. 213–219 (ver p. 15).
- [5] P. W. Shor. “Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring”. Em: *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*. IEEE. 1994, pp. 124–134 (ver p. 16).
- [6] Zheng An, Hai-Jing Song, Qi-Kai He et al. “Quantum optimal control of multilevel dissipative quantum systems with reinforcement learning”. Em: *Phys. Rev. A* 103 (1 jan. de 2021), p. 012404. DOI: 10.1103/PhysRevA.103.012404. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.103.012404> (ver pp. 18, 79).
- [7] Lorenzo Campos Venuti, Domenico D’Alessandro e Daniel A. Lidar. “Optimal Control for Quantum Optimization of Closed and Open Systems”. Em: *Phys. Rev. Applied* 16 (5 nov. de 2021), p. 054023. DOI: 10.1103/PhysRevApplied.16.054023 (ver pp. 18, 52, 54, 79).
- [8] Christiane P Koch. “Controlling open quantum systems: tools, achievements, and limitations”. Em: *Journal of Physics: Condensed Matter* 28.21 (mai. de 2016), p. 213001. DOI: 10.1088/0953-8984/28/21/213001. URL: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/21/213001> (ver pp. 18, 79).
- [9] R. Roloff, M. Wenin e W. Pötz. “Optimal Control for Open Quantum Systems: Qubits and Quantum Gates”. Em: *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* 6.8 (2009), pp. 1837–1863. ISSN: 1546-1955. DOI: doi:10.1166/jctn.2009.1246. URL: <https://www.ingentaconnect.com/content/asp/jctn/2009/00000006/00000008/art00008> (ver pp. 18, 79).

- [10] D. A. Lidar, I. L. Chuang e K. B. Whaley. “Decoherence-Free Subspaces for Quantum Computation”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 81 (12 set. de 1998), pp. 2594–2597. DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.2594. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.2594> (ver pp. 18, 79).
- [11] L.-A. Wu, P. Zanardi e D. A. Lidar. “Holonomic Quantum Computation in Decoherence-Free Subspaces”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 95 (13 set. de 2005), p. 130501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.130501. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.130501> (ver pp. 18, 79).
- [12] Paul G. Kwiat, Andrew J. Berglund, Joseph B. Altepeter et al. “Experimental Verification of Decoherence-Free Subspaces”. Em: *Science* 290.5491 (2000), pp. 498–501. DOI: 10.1126/science.290.5491.498. eprint: <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.290.5491.498>. URL: <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.290.5491.498> (ver pp. 18, 79).
- [13] Lorenza Viola, Emanuel Knill e Seth Lloyd. “Dynamical Decoupling of Open Quantum Systems”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 82 (12 mar. de 1999), pp. 2417–2421. DOI: 10.1103/PhysRevLett.82.2417. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.82.2417> (ver pp. 18, 79).
- [14] Alexandre M. Souza, Gonzalo A. Álvarez e Dieter Suter. “Robust Dynamical Decoupling for Quantum Computing and Quantum Memory”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 106 (24 mar. de 2011), p. 240501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.240501. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.240501> (ver pp. 18, 79).
- [15] L. Viola, E. M. Fortunato, M. A. Pravia et al. Em: *Science* 293 (2001), p. 2059 (ver pp. 18, 79).
- [16] Jens Clausen, Guy Bensky e Gershon Kurizki. “Bath-Optimized Minimal-Energy Protection of Quantum Operations from Decoherence”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 104 (4 jan. de 2010), p. 040401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.040401. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.040401> (ver pp. 18, 79).
- [17] Michael H Goerz, Daniel M Reich e Christiane P Koch. “Optimal control theory for a unitary operation under dissipative evolution”. Em: *New Journal of Physics* 16.5 (mai. de 2014), p. 055012. DOI: 10.1088/1367-2630/16/5/055012. URL: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/5/055012> (ver pp. 18, 79–81, 85, 87, 88).

- [18] Harrison Ball, Michael J Biercuk, Andre R R Carvalho et al. “Software tools for quantum control: improving quantum computer performance through noise and error suppression”. Em: *Quantum Science and Technology* 6.4 (set. de 2021), p. 044011. DOI: 10.1088/2058-9565/abdca6. URL: <https://doi.org/10.1088/2058-9565/abdca6> (ver pp. 18, 79).
- [19] Amikam Levy, E. Torrontegui e Ronnie Kosloff. “Action-noise-assisted quantum control”. Em: *Phys. Rev. A* 96 (3 set. de 2017), p. 033417. DOI: 10.1103/PhysRevA.96.033417. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.96.033417> (ver pp. 18, 79).
- [20] Murphy Yuezhen Niu, Sergio Boixo, Vadim N. Smelyanskiy et al. “Universal quantum control through deep reinforcement learning”. Em: *npj Quantum Information* 5.1 (abr. de 2019), p. 33. ISSN: 2056-6387. DOI: 10.1038/s41534-019-0141-3. URL: <https://doi.org/10.1038/s41534-019-0141-3> (ver pp. 18, 79).
- [21] Amikam Levy, A Kiely, J G Muga et al. “Noise resistant quantum control using dynamical invariants”. Em: *New Journal of Physics* 20.2 (fev. de 2018), p. 025006. DOI: 10.1088/1367-2630/aaa9e5. URL: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/aaa9e5> (ver pp. 18, 79).
- [22] John Clarke e Frank K. Wilhelm. “Superconducting quantum bits”. Em: *Nature* 453.7198 (mar. de 2008), pp. 1031–1042. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/nature07128. URL: <https://doi.org/10.1038/nature07128> (ver pp. 18, 80).
- [23] Tameem Albash e Daniel A. Lidar. “Adiabatic quantum computation”. Em: *Rev. Mod. Phys.* 90 (1 jan. de 2018), p. 015002. DOI: 10.1103/RevModPhys.90.015002 (ver pp. 18, 49).
- [24] R. Barends, A. Shabani, L. Lamata et al. “Digitized adiabatic quantum computing with a superconducting circuit”. Em: *Nature* 534.7606 (mar. de 2016), pp. 222–226. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/nature17658 (ver pp. 18, 49).
- [25] Dave Bacon e Steven T. Flammia. “Adiabatic Gate Teleportation”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 103 (12 set. de 2009), p. 120504. DOI: 10.1103/PhysRevLett.103.120504 (ver pp. 18, 51, 58, 71).
- [26] Alan C. Santos, Raphael D. Silva e Marcelo S. Sarandy. “Shortcut to adiabatic gate teleportation”. Em: *Phys. Rev. A* 93 (1 jan. de 2016), p. 012311. DOI: 10.1103/PhysRevA.93.012311 (ver p. 18).

- [27] Carlos Alexandre Brasil, Felipe Fernandes Fanchini e Reginaldo de Jesus Napolitano. “A simple derivation of the Lindblad equation”. en. Em: *Revista Brasileira de Ensino de Física* 35 (mar. de 2013), pp. 01–09. ISSN: 1806-1117. URL: [http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1806-11172013000100003&nrm=iso](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172013000100003&nrm=iso) (ver p. 37).
- [28] Robert G. Parr e Yang Weitao. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Apêndice A. Oxford University Press, USA, 1994. ISBN: 0195092767. URL: <https://books.google.com.br/books?id=mG0pScSIwU4C&lpg=PP1&hl=pt-BR&pg=PP1> (ver p. 38).
- [29] Wikipedia. *Functional derivative*. [https://en.wikipedia.org/wiki/Functional\\_derivative](https://en.wikipedia.org/wiki/Functional_derivative). Acessado em: 2023-09-12 (ver p. 38).
- [30] Jeff Bezanson, Alan Edelman, Stefan Karpinski et al. “Julia: A Fresh Approach to Numerical Computing”. Em: *SIAM Review* 59.1 (2017), pp. 65–98. DOI: 10.1137/141000671. eprint: <https://doi.org/10.1137/141000671>. URL: <https://doi.org/10.1137/141000671> (ver p. 48).
- [31] Laurence J. Kedward, Balint Aradi, Ondrej Certik et al. “The State of Fortran”. Em: *Computing in Science & Engineering* 24.2 (2022), pp. 63–72. DOI: 10.1109/MCSE.2022.3159862 (ver p. 48).
- [32] Frank Arute, Kunal Arya, Ryan Babbush et al. “Quantum supremacy using a programmable superconducting processor”. Em: *Nature* 574.7779 (out. de 2019), pp. 505–510 (ver p. 49).
- [33] K. Wright, K. M. Beck, S. Debnath et al. “Benchmarking an 11-qubit quantum computer”. Em: *Nature Communications* 10.1 (nov. de 2019), p. 5464. DOI: 10.1038/s41467-019-13534-2 (ver p. 49).
- [34] Alberto Peruzzo, Jarrod McClean, Peter Shadbolt et al. “A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor”. Em: *Nature Communications* 5.1 (jul. de 2014), p. 4213. DOI: 10.1038/ncomms5213 (ver p. 49).
- [35] John Preskill. “Quantum Computing in the NISQ era and beyond”. Em: *Quantum* 2 (ago. de 2018), p. 79. DOI: 10.22331/q-2018-08-06-79 (ver pp. 49, 66).
- [36] Abhinav Kandala, Antonio Mezzacapo, Kristan Temme et al. “Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets”. Em: *Nature* 549.7671 (set. de 2017), pp. 242–246 (ver p. 49).
- [37] Edward Farhi, Jeffrey Goldstone e Sam Gutmann. “A Quantum Approximate Optimization Algorithm”. Em: *arXiv:1411.4028* (2014) (ver p. 49).
- [38] Frank Arute, Kunal Arya, Ryan Babbush et al. “Hartree-Fock on a superconducting qubit quantum computer”. Em: *Science* 369.6507 (2020), pp. 1084–1089. DOI: 10.1126/science.abb9811 (ver p. 49).



- [39] Vedran Dunjko e Peter Wittek. “A non-review of Quantum Machine Learning: trends and explorations”. Em: *Quantum Views* 4 (2020), p. 32. DOI: 10.22331/qv-2020-03-17-32 (ver p. 49).
- [40] Matthew P. Harrigan, Kevin J. Sung, Matthew Neeley et al. “Quantum approximate optimization of non-planar graph problems on a planar superconducting processor”. Em: *Nature Physics* 17.3 (mar. de 2021), pp. 332–336. ISSN: 1745-2481. DOI: 10.1038/s41567-020-01105-y (ver p. 49).
- [41] Juneseo Lee, Alicia B. Magann, Herschel A. Rabitz et al. “Progress toward favorable landscapes in quantum combinatorial optimization”. Em: *Phys. Rev. A* 104 (3 set. de 2021), p. 032401. DOI: 10.1103/PhysRevA.104.032401 (ver p. 49).
- [42] Narendra N. Hegade, Koushik Paul, Yongcheng Ding et al. “Shortcuts to Adiabaticity in Digitized Adiabatic Quantum Computing”. Em: *Phys. Rev. Applied* 15 (2 fev. de 2021), p. 024038. DOI: 10.1103/PhysRevApplied.15.024038 (ver p. 50).
- [43] Luise Prielinger, Andreas Hartmann, Yu Yamashiro et al. “Two-parameter counter-diabatic driving in quantum annealing”. Em: *Phys. Rev. Research* 3 (1 mar. de 2021), p. 013227. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.013227 (ver p. 50).
- [44] M Cerezo, Andrew Arrasmith, Ryan Babbush et al. “Variational quantum algorithms”. Em: *Nature Reviews Physics* 3.9 (set. de 2021), pp. 625–644 (ver p. 50).
- [45] Matija Medvidović e Giuseppe Carleo. “Classical variational simulation of the Quantum Approximate Optimization Algorithm”. Em: *npj Quantum Information* 7.1 (jun. de 2021), p. 101 (ver p. 50).
- [46] Madita Willsch, Dennis Willsch, Fengping Jin et al. “Benchmarking the quantum approximate optimization algorithm”. Em: *Quantum Information Processing* 19.7 (mar. de 2020), p. 197. DOI: 10.1007/s11128-020-02692-8 (ver p. 50).
- [47] Alexandre Choquette, Agustin Di Paolo, Panagiotis Kl. Barkoutsos et al. “Quantum-optimal-control-inspired ansatz for variational quantum algorithms”. Em: *Phys. Rev. Research* 3 (2 mai. de 2021), p. 023092. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.023092 (ver p. 50).
- [48] Chungwei Lin, Yebin Wang, Grigory Kolesov et al. “Application of Pontryagin’s minimum principle to Grover’s quantum search problem”. Em: *Phys. Rev. A* 100 (2 ago. de 2019), p. 022327. DOI: 10.1103/PhysRevA.100.022327 (ver p. 50).

- [49] Gregory Riviello, Katharine Moore Tibbetts, Constantin Brif et al. “Searching for quantum optimal controls under severe constraints”. Em: *Phys. Rev. A* 91 (4 abr. de 2015), p. 043401. DOI: 10.1103/PhysRevA.91.043401 (ver p. 50).
- [50] Stefan Isermann. “On the optimal schedule of adiabatic quantum computing”. Em: *Quantum Information Processing* 20.9 (set. de 2021), p. 300. DOI: 10.1007/s11128-021-03227-5 (ver p. 50).
- [51] Zhi-Cheng Yang, Armin Rahmani, Alireza Shabani et al. “Optimizing Variational Quantum Algorithms Using Pontryagin’s Minimum Principle”. Em: *Phys. Rev. X* 7 (2 mai. de 2017), p. 021027. DOI: 10.1103/PhysRevX.7.021027 (ver p. 50).
- [52] Lucas T. Brady, Christopher L. Baldwin, Aniruddha Bapat et al. “Optimal Protocols in Quantum Annealing and Quantum Approximate Optimization Algorithm Problems”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 126 (7 fev. de 2021), p. 070505. DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.070505 (ver pp. 50, 52, 54, 55, 57).
- [53] Donald E. Kirk. *Optimal control theory: An introduction*. Englewood Cliffs, N.J: Prentice-Hall, 1970 (ver pp. 52, 53).
- [54] Daniel Liberzon. *Calculus of Variations and Optimal Control Theory A Concise Introduction*. Princeton, N.J: Princeton University Press, 2012 (ver p. 52).
- [55] U. Boscain, M. Sigalotti e D. Sugny. “Introduction to the Pontryagin Maximum Principle for Quantum Optimal Control”. Em: *PRX Quantum* 2 (3 set. de 2021), p. 030203. DOI: 10.1103/PRXQuantum.2.030203 (ver p. 52).
- [56] Tak-San Ho e Herschel Rabitz. “Accelerated monotonic convergence of optimal control over quantum dynamics”. Em: *Phys. Rev. E* 82 (2 ago. de 2010), p. 026703. DOI: 10.1103/PhysRevE.82.026703 (ver pp. 56, 57).
- [57] Leonardo K. Castelano, Emanuel F. de Lima, Justino R. Madureira et al. “Optimal control of universal quantum gates in a double quantum dot”. Em: *Phys. Rev. B* 97 (23 mar. de 2018), p. 235301. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.235301 (ver p. 56).
- [58] C. M. Rivera-Ruiz, E. F. de Lima, F. F. Fanchini et al. “Optimal control of hybrid qubits: Implementing the quantum permutation algorithm”. Em: *Phys. Rev. A* 97 (3 mar. de 2018), p. 032332. DOI: 10.1103/PhysRevA.97.032332 (ver p. 56).
- [59] Joao Paulo Papa, Gustavo Henrique Rosa, Douglas Rodrigues et al. “LibOPT: An Open-Source Platform for Fast Prototyping Soft Optimization Techniques”. Em: *arXiv:1704.05174* (2017) (ver p. 57).
- [60] I. Sousa-Ferreira e D. Sousa. “A review of velocity-type PSO variants”. Em: *JOURNAL OF ALGORITHMS & COMPUTATIONAL TECHNOLOGY* 11.1 (2016), pp. 23–30. DOI: 10.1177/1748301816665021 (ver p. 57).

- [61] Herschel Rabitz, Michael Hsieh e Carey Rosenthal. “Landscape for optimal control of quantum-mechanical unitary transformations”. Em: *Phys. Rev. A* 72 (5 nov. de 2005), p. 052337. DOI: 10.1103/PhysRevA.72.052337 (ver p. 63).
- [62] Alan C. Santos, Raphael D. Silva e Marcelo S. Sarandy. “Shortcut to adiabatic gate teleportation”. Em: *Phys. Rev. A* 93 (1 jan. de 2016), p. 012311. DOI: 10.1103/PhysRevA.93.012311 (ver p. 64).
- [63] Sebastian Deffner. “Energetic cost of Hamiltonian quantum gates”. Em: *European Physics Letters* 134.4 (mai. de 2021), p. 40002. DOI: 10.1209/0295-5075/134/40002 (ver p. 64).
- [64] R. Schmidt, A. Negretti, J. Ankerhold et al. “Optimal Control of Open Quantum Systems: Cooperative Effects of Driving and Dissipation”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 107 (13 set. de 2011), p. 130404. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.130404. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.107.130404> (ver p. 79).
- [65] Bin Hwang e Hsi-Sheng Goan. “Optimal control for non-Markovian open quantum systems”. Em: *Phys. Rev. A* 85 (3 mar. de 2012), p. 032321. DOI: 10.1103/PhysRevA.85.032321. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.85.032321> (ver p. 79).
- [66] Yi Chou, Shang-Yu Huang e Hsi-Sheng Goan. “Optimal control of fast and high-fidelity quantum gates with electron and nuclear spins of a nitrogen-vacancy center in diamond”. Em: *Phys. Rev. A* 91 (5 mai. de 2015), p. 052315. DOI: 10.1103/PhysRevA.91.052315. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.91.052315> (ver p. 79).
- [67] K M Fonseca Romero e R Lo Franco. “Simple non-Markovian microscopic models for the depolarizing channel of a single qubit”. Em: *Physica Scripta* 86.6 (nov. de 2012), p. 065004. DOI: 10.1088/0031-8949/86/06/065004. URL: <https://doi.org/10.1088/0031-8949/86/06/065004> (ver p. 80).
- [68] José P. Palao e Ronnie Kosloff. “Quantum Computing by an Optimal Control Algorithm for Unitary Transformations”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 89 (18 out. de 2002), p. 188301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.89.188301. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.89.188301> (ver p. 80).
- [69] Zhan Shi, C. B. Simmons, Daniel R. Ward et al. “Fast coherent manipulation of three-electron states in a double quantum dot”. Em: *Nature Communications* 5.1 (jan. de 2014), p. 3020. ISSN: 2041-1723. DOI: 10.1038/ncomms4020. URL: <https://doi.org/10.1038/ncomms4020> (ver p. 82).

- [70] C. M. Rivera-Ruiz, E. F. de Lima, F. F. Fanchini et al. “Optimal control of hybrid qubits: Implementing the quantum permutation algorithm”. Em: *Phys. Rev. A* 97 (3 mar. de 2018), p. 032332. DOI: 10.1103/PhysRevA.97.032332. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.97.032332> (ver pp. 82, 86).
- [71] A. B. Klimov, R. Guzmán, J. C. Retamal et al. “Qutrit quantum computer with trapped ions”. Em: *Phys. Rev. A* 67 (6 mar. de 2003), p. 062313. DOI: 10.1103/PhysRevA.67.062313. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.67.062313> (ver pp. 82, 89).
- [72] Carmen M. Tesch e Regina de Vivie-Riedle. “Vibrational molecular quantum computing: Basis set independence and theoretical realization of the Deutsch–Jozsa algorithm”. Em: *The Journal of Chemical Physics* 121.24 (2004), pp. 12158–12168. DOI: 10.1063/1.1818131. eprint: <https://aip.scitation.org/doi/pdf/10.1063/1.1818131>. URL: <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1818131> (ver p. 86).
- [73] José P. Palao e Ronnie Kosloff. “Optimal control theory for unitary transformations”. Em: *Phys. Rev. A* 68 (6 dez. de 2003), p. 062308. DOI: 10.1103/PhysRevA.68.062308. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.68.062308> (ver p. 86).
- [74] Hans-Jürgen Sommers e Karol Zyczkowski. “Statistical properties of random density matrices”. Em: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 37.35 (ago. de 2004), pp. 8457–8466. DOI: 10.1088/0305-4470/37/35/004. URL: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/37/35/004> (ver pp. 75, 87, 92).