



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
Câmpus de São José do Rio Preto

Alaor Cervati Neto

Teoria de Controle Ótimo em Sistemas Abertos

São José do Rio Preto

2018

Alaor Cervati Neto

Teoria de Controle Ótimo em Sistemas Abertos

Dissertação de Mestrado elaborada junto ao programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação - Área de Concentração em Computação Científica, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Ciência da Computação

Financiadora: CAPES

Orientador: Prof. Dr. Felipe Fernandes Fanchini

São José do Rio Preto

2018

Cervati Neto, Alaor.

Teoria de controle ótimo em sistemas abertos / Alaor Cervati Neto. --
São José do Rio Preto, 2017

91 f. : il.

Orientador: Felipe Fernandes Fanchini

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista “Júlio de
Mesquita Filho”, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas

1. Computação. 2. Computação quântica. 3. Teoria quântica -
Computação. 4. Teoria quântica - Informação. I. Universidade Estadual
Paulista "Júlio de Mesquita Filho". Instituto de Biociências, Letras e
Ciências Exatas. II. Título.

CDU – 530.145

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do IBILCE
UNESP - Câmpus de São José do Rio Preto

Alaor Cervati Neto

Teoria de Controle Ótimo em Sistemas Abertos

Dissertação de Mestrado elaborada junto ao programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação - Área de Concentração em Computação Científica, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Ciência da Computação

Financiadora: CAPES

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Felipe Fernandes Fanchini
UNESP - Bauru
Orientador

Prof. Dr. André Luiz Malvezzi
UNESP - Bauru

Prof. Dr. Alexandre Luis Magalhães Levada
UFSCar - São Carlos

Bauru
29 de Janeiro de 2018

Sumário

Introdução	1
I Teoria da Informação e Computação Quântica	3
1 Mecânica Quântica	4
1.1 Estado Quântico	5
1.2 O Bit Quântico	7
1.2.1 Condições para Ortonormalidade	8
1.3 Operador Densidade	9
1.4 Postulados da Mecânica Quântica	11
1.4.1 Operadores adjuntos e Hermitianos	13
1.4.2 Produto Tensorial	13
1.5 População e Coerência	14
1.6 Sistemas Quânticos Compostos	15
1.6.1 Traço Parcial e Operador Densidade Reduzido	16
1.6.2 Emaranhamento	17
1.6.3 Caracterização do Emaranhamento e Critério de Separabilidade	18
2 Teoria da Informação	20
2.1 Entropia de Shannon	20
2.1.1 O bit como unidade de informação clássica	22
2.1.2 Entropia Conjunta	23
2.1.3 Entropia Condicionada e Entropia Condicional	24
2.1.4 Informação Mútua	25
2.1.5 Entropia Relativa	25
2.2 Entropia de von Neumann	27
2.2.1 Entropia Quântica Relativa	28
2.2.2 Propriedades Básicas da Entropia	30
2.2.3 Discórdia Quântica	31
3 Computação Quântica	34
3.1 Portas Lógicas Quânticas	34
3.1.1 Portas de um qubit	34
3.1.2 Portas de múltiplos qubits	35
3.2 Teorema da Não Clonagem	36
3.3 Teletransporte Quântico	36

II	Sistemas Quânticos Abertos	40
4	Modelos de Sistemas Quânticos Abertos	41
4.1	Operadores de Kraus	42
4.2	Ruído Quântico	44
4.3	Atenuação de Amplitude	45
4.4	Atenuação de Fase	47
4.5	Otimização do Campo de Controle	49
5	Markovianidade	53
5.1	Sistemas Markovianos	53
5.2	Sistemas Não-Markovianos	54
5.2.1	Intensidade dos Efeitos de Memória	54
5.2.2	Otimização da Medida Baseada em Emaranhamento	55
III	Resultados	57
6	Inequivalência das Medidas de não-Markovianidade	58
6.1	Fluxo de Informação Acessível e Inacessível	59
7	Teoria de Controle em Sistemas Markovianos	63
8	Perspectivas	67
	Conclusões	68
	Bibliografia	69
ANEXO A	Método de Adams-Bashforth-Moulton para Equações Diferenciais Ordinárias	72

Lista de ilustrações

Figura 1 – Experimento de Young.	5
Figura 2 – Representação geométrica do estado $ \psi\rangle$, para $\varphi = 0$	7
Figura 3 – Representações Gráficas: (a) Representação gráfica de um qubit: Esfera de Bloch. (b) Representação gráfica de um bit clássico: dois estados possíveis.	8
Figura 4 – Diagrama das relações entre entropia e informação mútua.	26
Figura 5 – Diagrama de Venn para sistemas quânticos.	33
Figura 6 – Circuito de Teletransporte Quântico.	38
Figura 7 – Ilustração do processo de ajuste iterativo do campo de controle.	52
Figura 8 – Evolução Temporal do emaranhamento de formação para o modelo de atenuação de amplitude considerado com $t_c = 0.25$. O detalhe mostra a região de interesse. O estado inicial para o sistema e para o auxiliar é $ \phi^+\rangle$	59
Figura 9 – Evolução Temporal da informação mútua para o modelo de atenuação de amplitude considerado com $t_c = 0.25$. O detalhe mostra a região de interesse. O estado inicial para o sistema e para o auxiliar é $ \phi^+\rangle$	60
Figura 10 – Dinâmicas da informação acessível J_{AE}^{\leftarrow} , da informação inacessível δ_{AE}^{\leftarrow} e da informação mútua quântica I_{AE} (soma da informação acessível e inacessível) no intervalo de tempo de interesse deste estudo para a atenuação de amplitude generalizada.	61
Figura 11 – Gráficos da variação da fidelidade média em função de γ com 3 vínculos e condições iniciais reais para (a) atenuação de amplitude e (b) atenuação de fase.	64
Figura 12 – Gráficos da variação da fidelidade média em função de γ com 6 vínculos e condições iniciais reais para (a) atenuação de amplitude e (b) atenuação de fase.	65
Figura 13 – Gráficos da variação da fidelidade média em função de γ com condições iniciais complexas para (a) atenuação de amplitude e (b) atenuação de fase.	65

Resumo

A teoria de informação e computação quântica é uma área de pesquisa que vem crescendo de maneira acentuada nos últimos anos devido aos inúmeros avanços tecnológicos que a acompanham. Neste mestrado começamos nossos estudos nesta área de pesquisa onde nos introduzimos e aprofundamos em seus aspectos intrigantes e peculiares. Dada nossa formação inicial na área de ciências da computação, inicialmente nos dedicamos a entender os aspectos fundamentais da mecânica quântica, assim como da teoria de informação e computação quântica. Focamos principalmente nos sistemas quânticos abertos, visto que o maior obstáculo a ser superado para o desenvolvimento destes computadores é o efeito deletério do meio ambiente. A princípio, concentramos nossos estudos nos ditos processos não-Markovianos, que apresentam efeitos de memória. Aprendemos sobre as novas medidas de não-Markovianidade, principalmente as medidas baseadas na dinâmica do emaranhamento e na dinâmica da informação mútua. Conseguimos publicar nosso primeiro resultado, onde provamos a inequivalência destas duas medidas de não-Markovianidade. De fato, mostramos que tais medidas, em geral, podem discordar sobre o tipo de processo dissipativo, sendo que uma pode reconhecê-lo como Markoviano enquanto outra pode reconhecê-lo como não-Markoviano. Como mostramos, esta inequivalência está diretamente relacionada com o refluxo de informação do meio ambiente para o sistema, e como mensuramos tal informação nestas duas medidas distintas de não-Markovianidade. Finalmente, na fase final de nossos estudos, tivemos como objetivo encontrar um meio de otimizar o controle das operações lógicas. Especificamente, trabalhamos com um método numérico utilizado em sistemas fechados para otimizar sistemas abertos Markovianos. Observamos que a eficácia deste método depende do tipo e intensidade da interferência do ambiente e das condições iniciais do sistema, obtendo melhores resultados em casos específicos.

Palavras-chave: Computação quântica. Teoria da informação quântica. Sistemas quânticos abertos.

Abstract

Quantum information theory and computation is a field of research that has been growing acutely in the past few years due to the many technological improvements it follows. In this masters' course, we began our studies in this area of research where we were introduced and immersed in its intriguing and peculiar aspects. Given our initial formation in computer science, we initially dedicated ourselves to understanding the fundamentals of quantum mechanics, as well as of information theory and quantum computation. Our main focus were open quantum systems, since the greatest obstacle to the development of these computers is the harmful effect of the environment. At first, we concentrated our studies in the so called non-Markovian processes, that show memory effects. We learned about the new non-Markovianity measurements, mainly those based on the dynamics of entanglement and mutual information. We managed to publish our first result, where we proved the inequivalence of these two measurements of non-Markovianity. Indeed, we showed that such measurements, in general, can disagree about the dissipative process, so that one can regard it as Markovian and the other as non-Markovian. As we demonstrated, this inequivalence is directly related to the information back-flow from the environment to the system, and how this information is measured by each of the two distinct measurements. Finally, in the last stage of our studies, our goal was to find a way to optimize the control of the logical operations. Specifically, we worked with a numeric method used in closed systems to optimize Markovian open systems. We have observed that the effectiveness of this method depends on the type and intensity of the interference of the environment and of its initial conditions, attaining better results for specific cases.

Keywords: Quantum computation. Quantum information theory. Open quantum systems.

Introdução

Com a miniaturização dos microprocessadores chegando ao seu limite físico, a Lei de Moore, que diz que o poder computacional dobra a cada dois anos a um custo aproximadamente constante (MOORE, 1965), em breve não será mais válida. Para que o desenvolvimento de novos sistemas não cesse, será necessário encontrar uma forma de manter este aumento de capacidade. Uma alternativa interessante é apresentada pelo estudo de sistemas quânticos.

As propriedades da mecânica quântica fazem com que um sistema quântico se comporte de maneira distinta da esperada de um sistema clássico. Conceitos como superposição e emaranhamento operam de maneira inconsistente com as leis da mecânica clássica. Este novo paradigma abre inúmeras possibilidades para o desenvolvimento da computação baseada em sistemas quânticos.

Recentemente, muitos estudos têm sido feitos na área de Teoria da Informação Quântica (COVER; THOMAS, 2006). O interesse por essa área de estudo é justificado pelo fato de o processamento quântico apresentar propriedades que podem oferecer vantagens computacionais potencialmente significativas sobre o processamento clássico. Em particular, os algoritmos de busca não sequencial (GROVER, 1996) e fatoração (SHOR, 2006) quânticos têm se mostrado muito eficientes em comparação com os clássicos, e o desenvolvimento na área de criptografia quântica já resultou em soluções disponíveis comercialmente.

O desenvolvimento de um computador quântico, no entanto, não é uma tarefa simples devido à dificuldade de se manter um estado quântico isolado em condições realistas. Neste sentido, o primeiro passo para a realização da computação quântica é proteger tais estados da interferência destrutiva do ambiente. Alguns métodos numéricos foram propostos para manter as propriedades quânticas de um sistema aberto por mais tempo (CUI; XI; PAN, 2008) e para realizar operações lógicas sobre estes sistemas (LIMA; HO; RABITZ, 2014).

Neste trabalho será descrita a fundamentação da mecânica quântica, bem como algumas de suas propriedades menos intuitivas que a tornam diferente da física clássica. Também serão vistas as relações entre sistemas quânticos, suas representações vetoriais e uma propriedade, o emaranhamento, que é considerada importante para o estudo das relações entre esses sistemas. Depois são discutidos alguns conceitos de teoria da informação, como medidas da quantidade de informação transmitida, por exemplo, e apresentados análogos quânticos para esses conceitos. A seguir, há uma breve explicação sobre os fatores de interferência do ambiente sobre um sistema quântico e a descrição de modelos para tipos de interferência que terão particular relevância para o desenvolvimento deste trabalho. Finalmente, é explicitada a relação de uma dinâmica quântica com seus estados

pregressos e como esta afeta seus estados posteriores. São descritos os resultados obtidos durante o desenvolvimento do trabalho, bem como a perspectiva para trabalhos futuros com base nestes. A conclusão contextualiza a análise dos dados feita no capítulo anterior.

Parte I

Teoria da Informação e Computação Quântica

1 Mecânica Quântica

Até o início do século XX, a mecânica clássica considerava toda matéria como partícula e radiação como onda. Partindo de uma sugestão de Boltzmann em 1877 que os níveis de energia de uma molécula poderiam ser discretos, Planck (1901) utilizou a ideia de que a energia é quantizada (ou seja, que é emitida em unidades inteiras e indivisíveis) como um artifício matemático para determinar uma fórmula para a frequência observada na energia emitida por um corpo negro (denominada *Lei de Planck*).

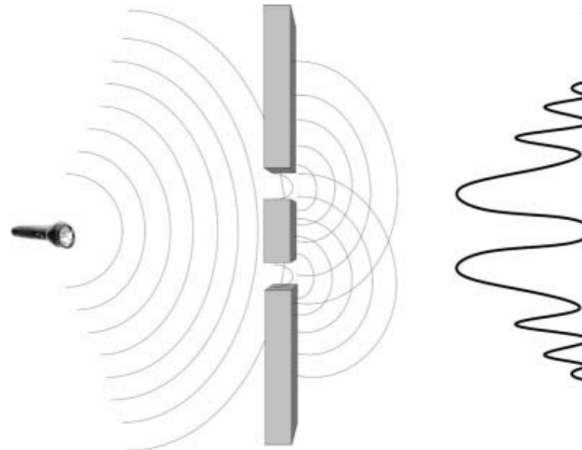
A aplicação da teoria de Planck permitiu que Bohr (1913) desenvolvesse um modelo que descrevesse a estrutura de um átomo (o *modelo atômico de Bohr*), considerando as distâncias entre seus elétrons como múltiplos inteiros de um dado valor, não ocupando posições intermediárias entre estas (o que serviu, também, para suprir uma deficiência do modelo proposto anteriormente por Rutherford). Da mesma forma, muitas quantidades que parecem contínuas na física clássica se mostraram discretas quando observadas na escala da mecânica quântica. A descoberta de que a ideia de Planck se adequava precisamente aos resultados obtidos formou a base a partir da qual se desenvolveu a mecânica quântica.

Em 1905, Einstein observou que, se a luz se propaga a partir de um ponto, sua energia não é distribuída continuamente sobre o espaço, mas consiste de um número finito de "*quanta* de energia" que são pontos localizados no espaço, e são absorvidas ou geradas individualmente e não podem ser divididas. Essas *quanta* de luz seriam conhecidas posteriormente como *fótons* (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOË, 1977). Da teoria da relatividade de Einstein, de Broglie, em 1923, derivou a teoria das ondas de matéria, que postulava que uma partícula pode exibir características de onda e vice versa.

Em um experimento realizado por Thomas Young em 1803, foi observado que a luz, se propagando como onda a partir de uma única fonte e passando por duas fendas até uma tela, gera um padrão de interferência nesta, como representado na Figura 1. As duas fendas fazem com que a onda se divida em duas ondas independentes, que interferem uma com a outra ao chegar na tela, fazendo com que algumas regiões apresentem picos de interferência construtiva. Este comportamento não é observado quando apenas uma fenda está aberta.

Variar o tempo de exposição da tela à luz emitida revela que, quando exposta por um tempo curto o suficiente para receber poucos fótons, cada fóton tem um impacto localizado e não um padrão de interferência fraco, como esperado de uma onda. Por outro lado, quando o tempo de exposição é grande, os padrões de interferência não desaparecem, como ocorreria se fossem causados apenas pela interação entre os fótons. Assim, foi formulado o conceito da dualidade onda-partícula: os aspectos de onda e partícula da luz são inseparáveis.

Figura 1 – Experimento de Young.



Fonte: Yanofsky e Mannucci (2008).

Esse experimento pode ser repetido com outras partículas além da luz, como elétrons, prótons ou mesmo núcleos atômicos, exibindo o mesmo padrão de interferência (e, de fato, esses experimentos foram realizados, demonstrando os resultados esperados). Desta forma, a distinção rígida entre ondas e partículas não existe no nível quântico.

1.1 Estado Quântico

Enquanto a posição de um objeto no sistema clássico é determinada por uma equação de movimento (como a equação do movimento retilíneo uniforme $s(t) = s_0 + v \cdot t$, por exemplo, sendo $s(t)$ a posição do objeto no tempo t , s_0 a posição inicial do objeto e v a velocidade com que ele se move), o estado de um sistema quântico pode ser representado por um vetor (COHEN-TANNOUJDI; DIU; LALOË, 1977). A qualquer sistema físico é associado um espaço vetorial complexo com produto interno (Espaço de Hilbert, \mathbb{H}), conhecido como espaço de estados do sistema. O sistema é completamente descrito pelo seu vetor de estado, um vetor unitário no espaço de estados.

O vetor que caracteriza um estado puro do sistema é descrito por $|\psi\rangle$ (denominado *ket*), seguindo a notação de Dirac. Um estado misto de um sistema não pode ser caracterizado por um único vetor $|\psi\rangle$, a representação correta destes estados é dada por uma mistura estatística de vários estados puros. Assim, um estado misto é caracterizado por um conjunto de estados $\{|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_i\rangle\}$ onde cada estado tem uma probabilidade p_i de ocorrer, de forma que a soma das probabilidades seja unitária, $\sum_i p_i = 1$. Um estado puro também pode ser visto como uma mistura estatística, caso no qual tem-se a probabilidade $p = 1$ associada a um estado e a probabilidade $p = 0$ associada aos demais estados.

Um observável é um operador Hermitiano no espaço de estados do sistema sendo observado. Sendo que o observável M descreve uma medida projetiva, sua decomposição

espectral é $M = \sum_m m P_m$, onde P_m é o projetor no autoespaço de M com autovalor m . Os resultados possíveis da medida correspondem aos autovalores m do observável. Ao se medir o estado $|\psi\rangle$, a probabilidade de se obter o resultado m é dada por $p(m) = \langle \psi | P_m | \psi \rangle$. Dado que m ocorreu, o estado do sistema quântico imediatamente após a medida é $\frac{P_m |\psi\rangle}{\sqrt{p(m)}}$. Assim, para um sistema físico com n possíveis resultados perfeitamente distinguíveis, pode-se associar uma coleção de estados ortonormais $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle\} \in \mathbb{H}$. Cada um desses estados representa uma possível resposta i do aparato de medida. Um estado arbitrário $|\psi\rangle$ que representa um sistema antes do experimento é determinado por uma das várias combinações lineares de todos os $|e_i\rangle$, onde $\{|e_i\rangle\}$ (o conjunto dos autovetores de um observável) forma uma base:

$$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i\rangle. \quad (1.1)$$

Para que esse vetor represente um estado físico é necessário que ele satisfaça a relação de completude $\sum_i |e_i\rangle \langle e_i| = \mathbb{1}$ e a condição de normalização $\sum_i |\alpha_i|^2 = 1$, pois os coeficientes $\{|\alpha_i|^2\}$ representam as probabilidades de ocorrência dos estados associados $\{|e_i\rangle\}$. Essa possibilidade de escrever o estado $|\psi\rangle$ na forma da Equação 1.1 com mais de um coeficiente α_i é chamada **Superposição de Estados** (MIRANDA, 2015).

O experimento de Stern-Gerlach mostra que os átomos têm uma propriedade chamada **spin**, uma espécie de momento angular intrínseco, que não tem contrapartida clássica. Quando a componente z , por exemplo, do **spin** é medida, sempre assume um dos dois valores: para cima ou para baixo. Portanto, uma medida de uma partícula **Spin**- $\frac{1}{2}$ na direção z tem dois resultados possíveis, e seu estado pode ser representado como um vetor. O primeiro resultado possível para o **Spin** é estar para cima, estado representado pelo vetor

$$|\uparrow\rangle = |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

e para a possibilidade de estar para baixo, é usado o vetor

$$|\downarrow\rangle = |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

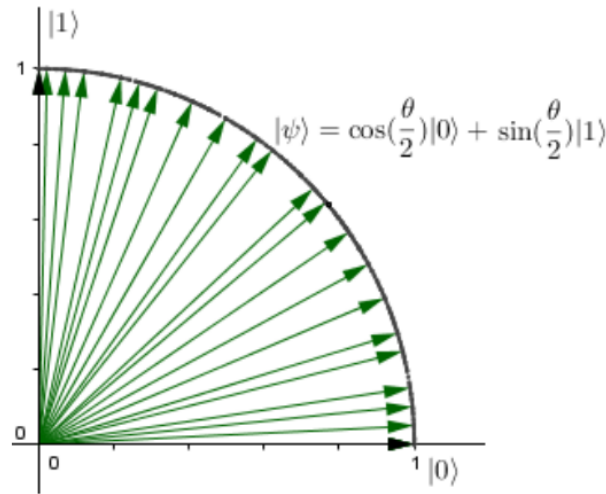
com um estado arbitrário sendo a combinação das duas possibilidades, representado por

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle, \quad (1.4)$$

onde $i = \sqrt{-1}$, para os intervalos $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Estes coeficientes satisfazem a condição de normalização

$$\langle \psi | \psi \rangle = \cos^2 \theta + e^{-i\varphi} e^{i\varphi} \sin^2 \theta = 1. \quad (1.5)$$

Há, ainda, uma interpretação geométrica para o estado $|\psi\rangle$, fixando $\varphi = 0$, representada na Figura 2.

Figura 2 – Representação geométrica do estado $|\psi\rangle$, para $\varphi = 0$.

Fonte: Miranda (2015).

1.2 O Bit Quântico

A grande diferença entre a computação clássica e a computação quântica é a unidade básica de informação: enquanto na computação clássica esta é o bit, que pode assumir os estados 0 ou 1, na computação quântica tem-se o bit quântico (*quantum bit*, mais comumente chamado *qubit*), que pode assumir os estados $|0\rangle$ ou $|1\rangle$, bem como todas as possíveis superposições desses dois estados

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (1.6)$$

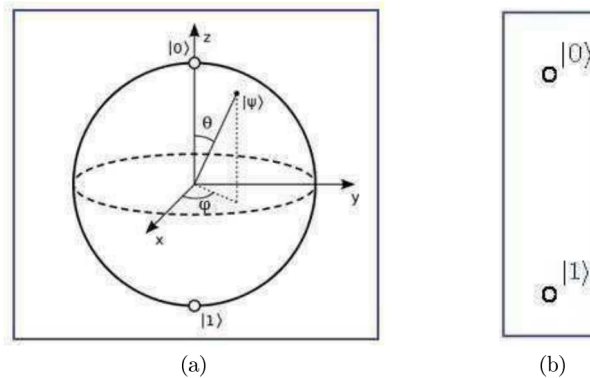
onde $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Quando esses estados resultantes têm igual probabilidade de ocorrência o estado superposto pode ser representado, por exemplo, como

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle = |+\rangle \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle = |-\rangle. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Assim, há infinitas possibilidades para o estado de um qubit, e apenas duas na representação de um bit clássico. A Figura 3, chamada Esfera de Bloch, representa a diferença na quantidade de informação contida em um bit quântico (Figura 3a) e em um bit clássico (Figura 3b) assim como outra representação geométrica dos valores θ e φ . Os estados possíveis de um bit são equivalentes a dois pontos: os polos de uma esfera de Bloch.

Fisicamente, um qubit representa o estado puro de um sistema de dois níveis. O experimento de Stern-Gerlach e um fóton polarizado são exemplos bem conhecidos de sistemas reais que podem ser modelados usando a definição de qubit. Isso porque os estados desses sistemas podem ser escritos como combinação linear de dois estados ortonormais. Tais experimentos são descritos pela teoria da mecânica quântica onde, pelo princípio da

Figura 3 – Representações Gráficas: (a) Representação gráfica de um qubit: Esfera de Bloch. (b) Representação gráfica de um bit clássico: dois estados possíveis.



Fonte: Pinto (2014).

superposição, o estado de um sistema pode ser descrito por uma combinação linear de outros estados. Um qubit modela de forma eficiente qualquer sistema físico que possa ser caracterizado por uma combinação linear de dois estados ortonormais.

1.2.1 Condições para Ortonormalidade

A representação dos estados de um sistema quântico na notação de Dirac assume duas formas: $|\psi\rangle$, chamada **ket** e $\langle\psi|$, chamada **bra** (de **bracket**, sendo a representação $\langle\psi|\psi\rangle$ denominada **bra-ket**). Um estado pode ser representado de qualquer uma das duas formas, levando-se em consideração a relação entre elas: $\langle\psi|$ é o transposto do complexo conjugado de $|\psi\rangle$ (também chamado de adjunto), ou seja, $\langle\psi| = (|\psi\rangle^t)^*$, também denotado $\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger$. Assim, se $|\psi\rangle$ é um vetor coluna, $\langle\psi|$ é um vetor linha e as operações entre eles seguem as regras das operações entre matrizes, $\langle\psi_1| \cdot |\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle$ é um número complexo e $|\psi_1\rangle\langle\psi_2|$ é uma matriz quadrada. Estes resultados são importantes para a computação quântica e serão melhor explorados mais adiante.

Uma base no espaço de Hilbert é composta por um conjunto de vetores ortonormais, que satisfazem duas condições: são ortogonais entre si, ou seja, seu produto escalar é nulo, e são normalizados, isto é, $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$, para $\delta_{ij} = 0, i \neq j$ e $\delta_{ij} = 1, i = j$. Assim, tem-se

que, para os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ que formam uma base no espaço de Hilbert:

$$\begin{aligned}\langle 0|0\rangle &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 1 \\ \langle 0|1\rangle &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \\ \langle 1|0\rangle &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 0 \\ \langle 1|1\rangle &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 1\end{aligned}\tag{1.8}$$

1.3 Operador Densidade

Conforme discutido na seção anterior, pode-se ter uma representação de um estado quântico como uma matriz $|\psi\rangle\langle\psi|$. Este tipo de matriz é chamado Operador Densidade ou matriz densidade de um estado quântico e permite a realização de outras operações além das possíveis com um vetor $|\psi\rangle$. Para um estado geral, dado um conjunto de estados puros $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$, onde p_i é a probabilidade i de ocorrer o estado $|\psi_i\rangle$, a definição do operador densidade é

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|.\tag{1.9}$$

Esse formalismo é mais conveniente para descrever um sistema quântico cujo estado não é completamente conhecido (NIELSEN; CHUANG, 2010).

Todos os postulados da mecânica quântica na formulação de vetor de estado têm análogo na notação de operador densidade, ou seja, o espaço vetorial associado aos operadores densidade é um espaço de Hilbert, e a evolução de um operador densidade isolado é descrita pelo operador unitário U atuando sobre o ket e o bra da Equação 1.9, sendo essa operação descrita por

$$\rho(t) = U(t) \rho(0) U^\dagger(t).\tag{1.10}$$

Também é possível descrever medidas por meio de operador densidade. Tendo operadores de medidas M_m (sendo estes projetores de uma base na qual a medida é feita) e realizando uma medida no estado $|\psi_i\rangle$, a probabilidade de o resultado da medida ser m é dada por

$$\begin{aligned}p(m|i) &= \langle\psi_i| M_m^\dagger M_m |\psi_i\rangle = \langle\psi_i| M_m^\dagger M_m \sum_i |i\rangle\langle i| |\psi_i\rangle = \\ &= \sum_i \langle i| M_m^\dagger M_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i|i\rangle = \text{tr}(M_m^\dagger M_m |\psi_i\rangle\langle\psi_i|),\end{aligned}\tag{1.11}$$

que de acordo com a lei de probabilidade total¹, a probabilidade de obter a medida M_m é dada pelo valor esperado da Equação 1.11

$$p(m) = \sum_i p_i p(m|i) = \sum_i p_i \text{tr} (M_m^\dagger M_m |\psi_i\rangle \langle \psi_i|) = \text{tr} \left(M_m^\dagger M_m \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) = \text{tr} (M_m^\dagger M_m \rho). \quad (1.12)$$

Após a medida o estado do sistema será

$$|\psi_i^m\rangle = \frac{M_m |\psi_i\rangle}{\sqrt{\langle \psi_i | M_m^\dagger M_m | \psi_i \rangle}}, \quad (1.13)$$

e conseqüentemente o operador densidade do conjunto de estados $|\psi_i^m\rangle$ é dado por

$$\rho = \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\text{tr} (M_m^\dagger M_m \rho)}. \quad (1.14)$$

Se um estado quântico $|\psi\rangle$ é totalmente conhecido, este estado é dito puro, e seu operador densidade será somente $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$. Também é possível que um sistema seja preparado no estado ρ_i com probabilidade p_i , sendo neste caso ρ uma mistura de estados dada por

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i. \quad (1.15)$$

Os operadores densidade devem obedecer também a condição $\text{tr}(\rho) = 1$ para que ρ represente um sistema físico, e deve ser um operador positivo, ou seja, todos os seus autovalores devem ser reais e positivos. Estas condições de traço 1 e de positividade permitem que ρ tenha uma decomposição espectral

$$\rho \equiv \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i|, \quad (1.16)$$

onde os vetores $|i\rangle$ são ortogonais e λ_i são os autovalores não negativos de ρ . Desta equação e do traço ser 1, é possível ver que há probabilidade λ_i de o sistema estar no estado $|i\rangle$.

Também da condição do traço 1 tem-se um critério para decidir se o estado é misto ou puro: sendo ρ um operador densidade, então $\text{tr}(\rho^2) \leq 1$, com igualdade se, e somente se, ρ é puro. Isso pode ser provado se, considerando $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$, onde $|\psi_i\rangle$ são os autovetores de ρ ,

$$\rho^2 = \sum_{i,j} p_i p_j |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi_j\rangle \langle \psi_j| = \sum_{i,j} p_i p_j |\psi_i\rangle \delta_{i,j} \langle \psi_j| = \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle \langle \psi_i|.$$

¹ $p(y) = \sum_x p(y|x)p(x)$ - Expressa a probabilidade total de um resultado que pode ser realizado através de vários eventos distintos.

Tomando o traço em ρ^2 , conclui-se que

$$\text{tr}(\rho^2) = \sum_i p_i^2 \leq 1,$$

o que indica que o estado é puro se $p_j = 1$ e $p_{i \neq j} = 0$ e uma mistura caso contrário.

Os elementos da matriz ρ podem ser calculados utilizando uma relação conhecida como relação de fechamento. Pode ser verificado que um conjunto de vetores é realmente uma base de um espaço de Hilbert se satisfaz essa relação. Para o conjunto $\{|a_i\rangle\}$ a relação de fechamento é dada por:

$$\sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = \mathbb{1}, \quad (1.17)$$

onde $\mathbb{1}$ é uma matriz identidade com a mesma dimensão do espaço vetorial em questão.

Por meio desta relação os elementos da matriz podem ser calculados observando que $\rho = \mathbb{1}\rho\mathbb{1}$, onde $\mathbb{1}$ é uma matriz identidade. Assim, para a base em consideração e assumindo que ρ é uma matriz densidade do sistema de interesse, tem-se que:

$$\rho = \sum_{i,j} |a_i\rangle \langle a_i| \rho |a_j\rangle \langle a_j|, \quad (1.18)$$

ou ainda:

$$\rho = \sum_{i,j} (\langle a_i| \rho |a_j\rangle) |a_i\rangle \langle a_j|, \quad (1.19)$$

o que também pode ser escrito como (PINTO, 2014):

$$\rho = \begin{pmatrix} \langle a_1| \rho |a_1\rangle & \langle a_1| \rho |a_2\rangle & \cdots & \langle a_1| \rho |a_j\rangle \\ \langle a_2| \rho |a_1\rangle & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \langle a_i| \rho |a_1\rangle & \cdots & \cdots & \langle a_i| \rho |a_j\rangle \end{pmatrix}. \quad (1.20)$$

Da fato os somatórios descritos pela Equação 1.18 e pela Equação 1.19 resultam em uma matriz, mas eventualmente pode-se usar somente os termos entre parênteses na Equação 1.19. Pode ser observado que estes termos resultam em um número e que este número depende dos índices i e j . Os índices i e j estão associados, respectivamente, à linha e à coluna que dão a localização do número $\langle a_i| \rho |a_j\rangle$ na matriz, ou seja, $\langle a_i| \rho |a_j\rangle$ são os componentes da matriz densidade.

1.4 Postulados da Mecânica Quântica

A mecânica quântica é um arcabouço matemático para o desenvolvimento de teorias físicas. Por si só, a mecânica quântica não descreve as leis que um sistema físico deve obedecer, mas provê as ferramentas matemáticas e conceituais para o desenvolvimento dessas leis. A seguir serão descritos brevemente os postulados básicos da mecânica quântica.

Estes postulados fornecem uma conexão entre o mundo físico e o formalismo matemático da mecânica quântica (NIELSEN; CHUANG, 2010). Outros conceitos necessários para sua compreensão também serão explorados nesta seção.

1º Postulado: Associado a qualquer sistema físico isolado há um espaço vetorial complexo com produto interno (isto é, um espaço de Hilbert) conhecido como *espaço de estados* do sistema. O sistema é descrito completamente por seu *vetor de estado*, que é um vetor unitário no espaço de estados do sistema.

2º Postulado: A evolução de um sistema quântico fechado é descrita por uma transformação unitária. Isto é, o estado $|\psi\rangle$ do sistema no tempo t_1 é relacionado ao estado $|\psi'\rangle$ do sistema no tempo t_2 por um operador unitário U que depende apenas dos tempos t_1 e t_2 ,

$$|\psi'\rangle = U(t_2, t_1) |\psi\rangle. \quad (1.21)$$

A evolução temporal do estado de um sistema quântico fechado é descrita pela equação de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \mathcal{H} |\psi\rangle. \quad (1.22)$$

Nesta equação, \hbar é uma constante física conhecida como constante de Planck cujo valor deve ser determinado experimentalmente. Na prática, o valor usado é 1, de modo que \hbar seja absorvido por \mathcal{H} , que é um operador Hermitiano fixo chamado Hamiltoniano do sistema fechado e representa a energia total do sistema.

3º Postulado: As medidas quânticas são descritas por um conjunto $\{M_m\}$ de operadores de medida, que agem sobre o espaço de estados do sistema a ser medido. O índice m se refere aos resultados da medida que podem ocorrer no experimento. Se o estado do sistema quântico é $|\psi\rangle$ imediatamente antes da medida então a probabilidade de o resultado m ocorrer é dada por

$$p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle, \quad (1.23)$$

e o estado do sistema após a medida é

$$\frac{M_m |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle}}. \quad (1.24)$$

Os operadores de medida satisfazem a equação de completudeza,

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = \mathbb{1}. \quad (1.25)$$

4º Postulado: O espaço de estados de um sistema físico composto é o produto tensorial dos espaços de estados dos sistemas físicos componentes. Ainda, havendo sistemas numerados de 1 a n , e o sistema i preparado no estado $|\psi_i\rangle$, então o estado conjunto total do sistema é $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle$.

1.4.1 Operadores adjuntos e Hermitianos

Uma matriz $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ é dita **simétrica** se $A^T = A$, ou seja, $A[j, k] = A[k, j]$. Por convenção, se $|v\rangle$ é um vetor, define-se $|v\rangle^\dagger \equiv \langle v|$. Em uma representação em matriz do operador A , a ação do conjugado Hermitiano é levar a matriz A à matriz transposta-conjugada $A^\dagger \equiv (A^*)^T$, onde $*$ indica o complexo conjugado, e T a operação de transposição (YANOFSKY; MANNUCCI, 2008). Um operador A cujo adjunto é A é conhecido como operador **Hermitiano** ou **autoadjunto**.

Uma classe importante de operadores Hermitianos é a dos **projetores**. Supondo W um subespaço vetorial k -dimensional do espaço vetorial V d -dimensional, é possível construir uma base ortonormal $|1\rangle, \dots, |d\rangle$ para V tal que $|1\rangle, \dots, |k\rangle$ seja uma base ortonormal para W . Por definição,

$$P \equiv \sum_{i=1}^k |i\rangle \langle i| \quad (1.26)$$

é o **projetor** no subespaço W . Esta definição independe da base ortonormal $|1\rangle, \dots, |k\rangle$ usada para W . Da definição pode-se mostrar que $|v\rangle \langle v|$ é Hermitiano para qualquer vetor $|v\rangle$, portanto, P é Hermitiano, $P^\dagger = P$.

1.4.2 Produto Tensorial

O produto tensorial é um meio de unir espaços vetoriais para formar um espaço vetorial maior. Sendo V e W espaços vetoriais de dimensões m e n , respectivamente (e, por conveniência, espaços de Hilbert), então $V \otimes W$ é um espaço vetorial de dimensão mn . Os elementos de $V \otimes W$ são combinações lineares de $|v\rangle \otimes |w\rangle$ dos elementos $|v\rangle$ de V e $|w\rangle$ de W . Em particular, se $|i\rangle$ e $|j\rangle$ são bases ortonormais para os espaços V e W , então $|i\rangle \otimes |j\rangle$ é uma base de $V \otimes W$. O produto tensorial $|v\rangle \otimes |w\rangle$ pode ser representado pelas notações abreviadas $|v\rangle |w\rangle$, $|v, w\rangle$ ou $|vw\rangle$ (NIELSEN; CHUANG, 2010).

Uma forma de tornar este conceito mais concreto é a representação matricial conhecida como produto de Kronecker. Supondo A uma matriz m por n , e B uma matriz p por q , tem-se a representação:

$$A \otimes B \equiv \left. \begin{array}{cccc} & \overbrace{\hspace{1.5cm}}^{n \cdot q} & & \\ \left[\begin{array}{cccc} A_{11}B & A_{12}B & \cdots & A_{1n}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \cdots & A_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1}B & A_{m2}B & \cdots & A_{mn}B \end{array} \right] & & & \\ \right\} & m \cdot p. & & \end{array} \right. \quad (1.27)$$

Nesta representação termos como $A_{11}B$ denotam submatrizes p por q cujas entradas são proporcionais a B , em relação a uma constante A . Por exemplo, o produto tensorial dos

vetores (1, 2) e (2, 3) é o vetor

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \cdot 2 \\ 1 \cdot 3 \\ 2 \cdot 2 \\ 2 \cdot 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \\ 6 \end{bmatrix}. \quad (1.28)$$

A notação $|\psi\rangle^{\otimes k}$ representa o produto tensorial de $|\psi\rangle$ consigo mesmo k vezes ($|\psi\rangle^{\otimes 2} = |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$, por exemplo). Uma notação análoga é usada para operadores sobre espaços de produtos tensoriais.

1.5 População e Coerência

Os elementos de uma matriz densidade possuem uma interpretação física. Levando em conta as definições da seção anterior, será feita uma análise destes elementos onde a matriz ρ representa um estado possível de um sistema quântico e o conjunto $\{|a_i\rangle\}$ uma possível base no espaço de Hilbert deste sistema. Assim, para calcular os elementos da matriz densidade ρ pode-se usar a relação descrita anteriormente ($\langle a_i | \rho | a_j \rangle$, sendo i número da linha e j número da coluna). A discussão desse resultado será feita em duas partes. Primeiro considerando somente os elementos da diagonal principal da matriz ρ e, em seguida, os elementos fora da diagonal principal.

Os elementos da diagonal principal são dados pelos números $\langle a_j | \rho | a_k \rangle$, com $j = k$ e são calculados como:

$$\langle a_j | \rho | a_j \rangle = \sum_i p_i \langle a_j | \psi_i \rangle \langle \psi_i | a_j \rangle = \sum_i p_i (|\langle a_j | \psi_i \rangle|^2). \quad (1.29)$$

Os elementos entre parênteses na equação acima indicam a probabilidade de um estado puro $|\psi_i\rangle$, colapsar para $|a_j\rangle$, quando realizada uma medida na base $\{|a_j\rangle\}$. Assim, observando a equação acima como um todo, vemos que os elementos da diagonal principal representam a probabilidade de encontrar o sistema em um dos elementos $|a_j\rangle$ da base, quando a medida é feita na própria base $\{|a_j\rangle\}$. Esta probabilidade é dada pela média entre as probabilidades $|\langle a_j | \psi_i \rangle|^2$ ponderada pelas probabilidades p_i do estado puro $|\psi_i\rangle$ ocorrer. Os elementos da diagonal principal são chamados de população.

Os elementos fora da diagonal principal são dados pelos números $\langle a_i | \rho | a_j \rangle$ com $i \neq j$ que são calculados como:

$$\langle a_i | \rho | a_j \rangle = \sum_k p_k \langle a_i | \psi_k \rangle \langle \psi_k | a_j \rangle = \sum_k p_k (c_i c_j^*),$$

onde $c_i \equiv \langle a_i | \psi_k \rangle$ e $c_j \equiv \langle a_j | \psi_k \rangle$. A interpretação física para os elementos fora da diagonal principal pode ser obtida observando primeiro o significado dos valores entre parênteses na equação acima. Na mecânica quântica um sistema de interesse pode ter o seu estado

descrito por uma combinação linear de mais estados e, quando este for o caso, o resultado de uma medida sobre o sistema pode estar sujeito à interferência destes estados. Os valores entre parênteses na equação acima indicam um fator de interferência para o estado puro $|\psi_k\rangle$, onde c_i e c_j são os coeficientes da expansão de $|\psi_k\rangle$ na base $\{|a_j\rangle\}$ (PINTO, 2014). Se a equação acima for vista como um todo é possível notar que os números fora da diagonal principal indicam a média dos fatores de interferência quando toma-se todo o conjunto de estados $\{|\psi_k\rangle\}$ que compõem a mistura estatística. Os elementos fora da diagonal principal em uma matriz densidade são denominados coerência e são frequentemente associados ao comportamento quântico de um sistema.

1.6 Sistemas Quânticos Compostos

Eventualmente pode ser de grande interesse uma representação que contenha informação a respeito de mais de um objeto quântico. Sistemas que se constituem de mais de um objeto são chamados sistemas compostos. O formalismo apresentado até aqui está de acordo com a representação de um sistema físico maior, isto é, um sistema que possa ser visto como composto por vários sistemas menores. Nesta seção será discutido como representar em uma única matriz densidade dois ou mais sistemas distintos.

A um sistema quântico tem-se associada uma matriz ou um vetor que caracteriza seu estado. Uma matriz densidade (assim como um vetor de estado) pertence a um espaço vetorial denominado espaço de Hilbert e este espaço vetorial é característico do sistema estudado. Toda matriz ou vetor que representa um estado possível de um sistema pertence ao espaço de Hilbert deste sistema. Considerando que o sistema a ser estudado é composto por diversos sistemas distintos onde a cada parcela do sistema total está associado um espaço de Hilbert, para o sistema como um todo também é possível definir um espaço de Hilbert e este espaço vetorial pode ser descrito a partir dos espaços de sistema menores. Assumindo que \mathbb{H}_i com $i = 1, 2, \dots, n$ representa o espaço de Hilbert da i -ésima parcela do sistema total, o espaço de Hilbert \mathbb{H} do sistema composto total fica descrito por:

$$\mathbb{H} = \mathbb{H}_1 \otimes \mathbb{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathbb{H}_n, \quad (1.30)$$

onde o símbolo \otimes representa um produto tensorial entre os espaços \mathbb{H}_i . A dimensão do espaço vetorial \mathbb{H} é dada por $\dim(\mathbb{H}) = \dim(\mathbb{H}_1) \dim(\mathbb{H}_2) \dots \dim(\mathbb{H}_n)$. Uma única matriz ou vetor que pertença ao espaço de Hilbert \mathbb{H} definido acima representa o estado do sistema como um todo.

Por exemplo, se o sistema de interesse se constitui por dois objetos apenas, a definição se torna:

$$\mathbb{H} = \mathbb{H}_1 \otimes \mathbb{H}_2,$$

que são comumente chamados de estados bipartidos. Este caso específico é de grande importância, pois sistemas compostos maiores sempre podem ser considerados como es-

tados bipartidos. Por exemplo, na Equação 1.30, pode-se definir $\mathbb{H}_A \equiv (\mathbb{H}_1)$ e $\mathbb{H}_B \equiv (\mathbb{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{H}_n)$ de forma que o sistema total pode ser escrito como $\mathbb{H} = \mathbb{H}_A \otimes \mathbb{H}_B$, ou seja, um sistema bipartido.

Quando o estado de um sistema bipartido é descrito por uma matriz densidade é possível desenvolver um formalismo matemático denominado traço parcial. A operação traço parcial permite que, a partir da matriz que representa o sistema total, se obtenha as duas matrizes que caracterizam as outras duas parcelas do sistema. Abaixo segue uma descrição mais detalhada desta operação.

Considerando dois sistemas denominados A e B , para cada sistema existe um espaço de Hilbert associado que será respectivamente descrito por \mathbb{H}_A e \mathbb{H}_B . Para uma dada matriz densidade ρ_{AB} que pertence ao espaço de Hilbert $\mathbb{H} = \mathbb{H}_A \otimes \mathbb{H}_B$ as operações traço parcial são definidas como:

$$\rho_A \equiv tr_B (\rho_{AB}), \quad (1.31)$$

$$\rho_B \equiv tr_A (\rho_{AB}), \quad (1.32)$$

onde as matrizes ρ_A e ρ_B caracterizam, respectivamente, o estado dos sistemas A e B e pertencem aos espaços de Hilbert \mathbb{H}_A e \mathbb{H}_B . Nestas definições, o traço é tomado sobre uma base de \mathbb{H}_B na primeira definição e sobre uma base de \mathbb{H}_A na segunda. Assim, para efetuar tais operações é preciso definir as bases dos espaços vetoriais \mathbb{H}_A e \mathbb{H}_B .

1.6.1 Traço Parcial e Operador Densidade Reduzido

Uma das aplicações mais importantes do operador densidade é como descrição de sub-sistemas de um sistema quântico composto, o que é obtido através do operador densidade reduzido. Supondo que se tenha os sistemas físicos A e B , descritos pelo operador densidade ρ_{AB} , uma possível matriz densidade reduzida é definida pela Equação 1.31, onde tr_B é um mapa de operadores chamado *traço parcial* sobre o sistema B . O traço parcial é definido como:

$$tr_b (|a_1\rangle \langle a_2| \otimes |b_1\rangle \langle b_2|) \equiv |a_1\rangle \langle a_2| tr (|b_1\rangle \langle b_2|), \quad (1.33)$$

onde $|a_1\rangle$ e $|a_2\rangle$ são dois vetores quaisquer do espaço de estados de A , e $|b_1\rangle$ e $|b_2\rangle$ são dois vetores quaisquer do espaço de estados de B (NIELSEN; CHUANG, 2010). A operação traço do lado direito da equação é a usual para o sistema B , isto é, $tr (|b_1\rangle \langle b_2|) = \langle b_1|b_2\rangle$.

Não é óbvio que o operador densidade reduzido do sistema A descreva de qualquer forma o sistema A . A justificativa física para esta identificação é o fato de o operador densidade reduzido fornecer as estatísticas de medida corretas para as medidas feitas no sistema A . Por exemplo, supondo um sistema quântico no estado produto $\rho_{AB} = \rho \otimes \sigma$, onde ρ é o operador densidade do sistema A e σ do sistema B , então

$$\rho_A = tr_B (\rho \otimes \sigma) = \rho tr (\sigma) = \rho, \quad (1.34)$$

que é o resultado intuitivamente esperado. Analogamente, $\rho_B = \sigma$ para este estado. Um exemplo menos trivial é o estado de Bell $\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$, que tem operador densidade

$$\rho = \left(\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{\langle 00| + \langle 11|}{\sqrt{2}} \right) = \frac{|00\rangle \langle 00| + |11\rangle \langle 00| + |00\rangle \langle 11| + |11\rangle \langle 11|}{2}. \quad (1.35)$$

Traçando o segundo qubit, encontra-se o operador densidade reduzido do primeiro qubit,

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \text{tr}_2(\rho) \\ &= \frac{\text{tr}_2(|00\rangle \langle 00|) + \text{tr}_2(|11\rangle \langle 00|) + \text{tr}_2(|00\rangle \langle 11|) + \text{tr}_2(|11\rangle \langle 11|)}{2} \\ &= \frac{|0\rangle \langle 0| \langle 0|0\rangle + |1\rangle \langle 0| \langle 0|1\rangle + |0\rangle \langle 1| \langle 1|0\rangle + |1\rangle \langle 1| \langle 1|1\rangle}{2} \\ &= \frac{|0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1|}{2} \\ &= \frac{\mathbb{1}}{2}. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Nota-se que o estado ρ_1 é *misto*, já que $\text{tr}\left(\left(\frac{\mathbb{1}}{2}\right)^2\right) = \frac{1}{2} < 1$. Este é um resultado interessante, pois embora o sistema conjunto de dois qubits esteja em um estado puro e, portanto, exatamente conhecido, o primeiro qubit está em um estado misto, sobre o qual não se tem conhecimento máximo (NIELSEN; CHUANG, 2010). Esta estranha propriedade, de um estado conjunto de um sistema ser completamente conhecido, mas ter um subsistema em um estado misto, é característica do emaranhamento quântico.

1.6.2 Emaranhamento

No ano de 1935 surge a primeira discussão sobre o conceito de emaranhamento. Em um artigo publicado por Einstein-Poldolsky-Rosen (EPR), onde questionam o princípio da superposição aplicado em sistemas compostos, EPR utilizam a ideia de superposição de sistemas compostos e uma definição de realidade física e da incapacidade de informações serem transmitidas a velocidades superiores à velocidade da luz para demonstrar que a mecânica quântica é uma teoria incompleta.

Também em 1935, Schrödinger descreve o paradoxo conhecido como *gato de Schrödinger*, no qual apresenta uma experiência imaginária na qual coloca um gato dentro de uma caixa completamente isolada. Dentro da caixa, coloca-se um mecanismo contendo um átomo instável que pode se tornar estável liberando energia que é usada para acionar um dispositivo que libera um gás mortal que mata o gato. De acordo com a Mecânica Quântica, só se pode determinar a probabilidade do átomo decair e não quando isso vai ocorrer.

O estado desse sistema imaginário pode ser escrito considerando o átomo instável como sendo $|A_1\rangle$ e $|A_0\rangle$ após a estabilização, e descrevendo a condição do gato com sendo vivo e

morto pelos estados $|Vivo\rangle$ e $|Morto\rangle$ respectivamente. Então o estado global do sistema é:

$$|\psi\rangle = \alpha |A_1, Vivo\rangle + \beta |A_0, Morto\rangle, \quad (1.37)$$

onde $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, ou seja, $|\alpha|^2$ e $|\beta|^2$ são as probabilidades do átomo decair ou não respectivamente. Essa ligação entre os dois subsistemas (gato e átomo) foi nomeada por Schrödinger como *Verschränkung* que foi traduzido para o inglês como *entanglement* e para o português como *emaranhamento*. Tanto EPR como o gato de Schrödinger questionavam aspectos de localidade e realismo da Mecânica Quântica que são questões importantes para a completude da teoria.

O realismo determina que os objetos existem independentemente e têm propriedades que podem ser medidas, e estas propriedades têm um único valor em qualquer espaço e tempo independente de serem medidas ou não. Assim, ainda que não sejam medidas, elas têm o mesmo valor preciso que teriam caso o fossem (WHAT..., 2016). O princípio da localidade postula que um objeto é influenciado diretamente somente por seu ambiente próximo. A ideia é que, para que uma ação em um ponto influencie outro ponto, algo no espaço entre eles deve transmitir esta ação, atravessando este espaço.

John Bell, em 1964, estabeleceu uma distinção absoluta entre a mecânica quântica e a mecânica clássica, considerando uma teoria local e com variáveis ocultas (SANTOS FERREIRA, 2015), que determinam o valor de medidas, e derivando limites superiores sobre as correlações de observáveis de tal teoria. Ele nota que alguns tipos especiais de estados emaranhados violam suas desigualdades, conhecidas como *desigualdades de Bell* (YANOFSKY; MANNUCCI, 2008). Bell dessa forma deixou claro a necessidade de na Mecânica Quântica se fazer uma escolha entre qual propriedade da teoria deve ser descartada, o realismo ou a localidade.

Escolhendo o realismo, admite-se a existência de variáveis ocultas desconhecidas, que fazem com que os resultados sejam os apresentados. Para a não localidade aceita-se que ocorrem interações a distância.

Não há uma teoria geral do emaranhamento, porém muitos estudos têm sido feitos com a intenção de entender essa estranha propriedade (NIELSEN; CHUANG, 2010). O emaranhamento é encarado como um recurso fundamental da Natureza, de importância comparável à energia, informação, entropia ou qualquer outro recurso fundamental para a computação quântica. Atualmente, existem muitas teorias para uso em sistemas emaranhados bipartidos (algumas das quais serão usadas mais adiante) e poucas para sistemas multipartidos.

1.6.3 Caracterização do Emaranhamento e Critério de Separabilidade

Inicialmente, caracteriza-se o espaço de estados onde estão os estados emaranhados como sendo o espaço de estados de um sistema físico composto. Segundo a Mecânica

Quântica, havendo sistemas quânticos numerados de 1 a n , cada sistema preparado no estado $|\psi_i\rangle$, decorre que o estado do sistema composto será $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle$ (NIELSEN; CHUANG, 2010 apud SANTOS FERREIRA, 2015).

Tendo dois sistemas quânticos denominados a e b , dito sistema bipartido, supõe-se que $|a\rangle = \lambda_0 |0_a\rangle + \lambda_1 |1_a\rangle$ seja um estado do sistema a e $|b\rangle = \gamma_0 |0_b\rangle + \gamma_1 |1_b\rangle$ seja um estado do sistema b , onde $|\lambda_0|^2 + |\lambda_1|^2 = 1$ e $|\gamma_0|^2 + |\gamma_1|^2 = 1$. O produto tensorial entre $|a\rangle$ e $|b\rangle$ será um estado do sistema composto ab . A representação desse estado do sistema composto de a e b será dada por

$$\begin{aligned} |\psi_{ab}\rangle &= |a\rangle \otimes |b\rangle = (\lambda_0 |0_a\rangle + \lambda_1 |1_a\rangle) \otimes (\gamma_0 |0_b\rangle + \gamma_1 |1_b\rangle) \\ &= \lambda_0 \gamma_0 |0_a\rangle \otimes |0_b\rangle + \lambda_0 \gamma_1 |0_a\rangle \otimes |1_b\rangle + \lambda_1 \gamma_0 |1_a\rangle \otimes |0_b\rangle + \lambda_1 \gamma_1 |1_a\rangle \otimes |1_b\rangle \\ &= \lambda_0 \gamma_0 |0_a 0_b\rangle + \lambda_0 \gamma_1 |0_a 1_b\rangle + \lambda_1 \gamma_0 |1_a 0_b\rangle + \lambda_1 \gamma_1 |1_a 1_b\rangle. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Pode-se ainda omitir os índices que indicam a qual sistema pertence o qubit e reescrever a equação acima como

$$|\psi_{ab}\rangle = \lambda_0 \gamma_0 |00\rangle + \lambda_0 \gamma_1 |01\rangle + \lambda_1 \gamma_0 |10\rangle + \lambda_1 \gamma_1 |11\rangle. \quad (1.39)$$

Um estado do sistema é dito emaranhado se não pode ser escrito como produtos de estados individuais do sistema. O estado $|\varphi_{ab}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|11\rangle - |10\rangle + |01\rangle - |00\rangle)$ não é emaranhado, pois pode ser separado como o produto de dois estados individuais

$$|\varphi_{ab}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |0\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - |0\rangle) = |\varphi_a\rangle |\varphi_b\rangle = |\varphi_a\rangle \otimes |\varphi_b\rangle. \quad (1.40)$$

Nem sempre é simples verificar se um estado composto é separável ou não, então para isso são utilizados alguns critérios. Para o caso de sistemas puros bipartidos, pode-se detectar se estão emaranhados ou não utilizando a Decomposição de Schmidt, que determina que, para um estado puro $|\varphi_{ab}\rangle$ de um sistema composto ab , existem estados ortonormais $|i_a\rangle$ para o sistema a e $|i_b\rangle$ para o sistema b tais que

$$|\psi_{ab}\rangle = \sum_i^n \sqrt{\lambda_i} |i_a\rangle |i_b\rangle, \quad (1.41)$$

onde $n = \min \{\dim a, \dim b\}$ e λ_i são os autovalores dos respectivos autovetores de $|\psi_{ab}\rangle$, números reais não negativos, conhecidos como coeficientes de Schmidt e $\sum_i \lambda_i = 1$. Se $\lambda_i = 1$ para um único valor de i o estado é separável e caso contrário é emaranhado.

2 Teoria da Informação

Claude Shannon propôs em 1948 um modo de quantificar a informação contida em uma mensagem, tratando-a como um fenômeno matemático (uma mudança na percepção do assunto de impacto semelhante à que ocorreu quando Boole, um século antes, sugeriu que a lógica era parte da matemática e não da filosofia), considerando os problemas na comunicação dessa informação sob o ponto de vista da estatística e probabilidade. Segundo o que ele denominou Teoria Matemática da Comunicação, seria possível associar valores probabilísticos a números binários e uma unidade de medida para a quantidade desses valores (mais especificamente, para a quantidade de informação de um dado evento, quando a probabilidade deste ocorrer é meio), inicialmente chamada *shannon*, mas posteriormente conhecida como *bit*. Devido à similaridade do conceito com o funcionamento da lógica computacional, o nome também foi usado para a unidade básica de armazenamento de dados em um computador.

Uma consequência importante da codificação de uma mensagem como um conjunto de sinais binários foi a redução da complexidade necessária para se estabelecer um canal de comunicação. Diferentemente da comunicação por sinais analógicos, que precisaria ser capaz de replicar uma onda eletromagnética (convertida de uma onda sonora, no caso de um telefone, por exemplo), um sinal digital, tendo apenas dois valores possíveis, precisa transmitir apenas uma corrente elétrica (sendo a presença da corrente 1 e a ausência 0) em intervalos regulares. Outro ponto importante do trabalho foi a determinação do cálculo do tamanho mínimo de um canal para o recebimento de uma mensagem considerando a possibilidade de haver erros ou interferência durante a transmissão, classificados genericamente como ruído.

Os resultados mais importantes desse trabalho foram, portanto, dois teoremas fundamentais do que viria a ser a teoria da informação: o *teorema da codificação em canais sem ruído*, que quantifica os recursos físicos necessários para transmitir uma informação e o *teorema da codificação em canais ruidosos*, que quantifica a informação que pode ser transmitida através de um canal ruidoso (SHANNON, 1948). Um ruído em uma mensagem com codificação binária, por exemplo, pode mudar um sinal de 0 para 1 (ou de 1 para 0), gerando uma incerteza em relação à mensagem recebida. Shannon mostrou que é possível proteger o conteúdo da mensagem usando códigos de proteção contra erros.

2.1 Entropia de Shannon

Um dos principais resultados da teoria da informação clássica é a Entropia de Shannon, aplicável a qualquer sistema descrito por uma variável aleatória. A Entropia de Shannon,

também chamada Entropia Clássica da Informação, é obtida através da equação

$$H(X) \equiv - \sum_x p(x) \log p(x), \quad (2.1)$$

onde X é uma variável aleatória discreta na forma de uma tripla (x, A_X, P_X) , sendo x o índice dos vetores $A_X = \{a_1, a_2, \dots, a_i\}$, que lista o símbolos nos quais a mensagem é codificada, $P_X = \{p_1, p_1, \dots, p_i\}$, que dá a probabilidade de cada respectivo símbolo. Como esses valores são obtidos através de estatística e probabilidade, $p(x = a_i) \geq 0$ e $\sum_{x \in A_X} p(x = a_i) = 1$.

Dado que o canal de informação suporta dois níveis (0 ou 1, por transmitir bits), $\log p(x)$ é, mais especificamente, $\log_2 p(x)$. Para outras formas de transmissão, $\log p(x)$ tem bases diferentes. Por convenção,

$$0 \log 0 \equiv 0, \quad (2.2)$$

pois $\lim_{p(x) \rightarrow 0^+} -p(x) \log p(x) = 0$. O valor da entropia, portanto, é um número real que tem duas interpretações distintas, dependendo do ponto em que é calculado: se antes ou depois de o sistema ser medido. Fazer uma medida em um sistema probabilístico, como são chamados os sistemas descritos por uma variável aleatória, significa obter um dos possíveis eventos associados ao sistema, ou ainda fazer uma medida sobre esta variável. Assim, se a entropia for calculada antes de se saber o resultado de uma medida, ela quantifica a incerteza em relação a este resultado e, se for calculada após uma medida, mede a quantidade média de informação que é obtida com o resultado de uma medida (SHANNON; WEAVER, 1964).

O caso simples de uma variável aleatória com dois resultados possíveis, que caracteriza um sistema binário, auxilia na compreensão da entropia como medida de incerteza sobre um sistema. Considerando uma variável aleatória que pode assumir os valores 0 e 1, se a probabilidade $p_0 = p$ estiver associada ao estado 0, a probabilidade de ocorrer o estado 1 deve ser $p_1 = (1 - p)$. Sendo $x = \{0, 1\}$, $A_X = \{0, 1\}$ e $P_X = \{p, 1 - p\}$, a Equação 2.1 pode ser escrita como

$$\begin{aligned} H(p_0, p_1) &= -p_0 \log_2 p_0 - p_1 \log_2 p_1, \\ H(p_0, p_1) &= H(p) = -p \log_2 p - (1 - p) \log_2 (1 - p). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Pode ser notado que a entropia assume o valor máximo ($H = 1$) quando $p = 0.5$, ou seja, quando os dois estados ocorrem com a mesma probabilidade, o que condiz com a interpretação da entropia como medida de incerteza nos resultados do sistema. Para a entropia máxima, há a mesma chance de conhecer ambos os estados e, portanto, a incerteza sob qual resultado será obtido é máxima. Supondo uma probabilidade maior para um dos resultados, como $p = 0.8$ por exemplo, a entropia diminui, assim como a incerteza no resultado, pois ao realizar o experimento os resultados tendem para um valor.

No caso extremo onde $p = 1$ (ou $p = 0$) a entropia é zero, pois tanto a informação obtida com a medida quanto incerteza sobre o resultado são nulas, já que o valor é conhecido antes de realizada a medida, sendo com certeza 0 (ou 1).

2.1.1 O bit como unidade de informação clássica

Uma mensagem pode ser vista como uma sequência de resultados para uma variável aleatória. Se forem realizadas várias medidas sobre um sistema probabilístico, tem-se uma sequência de resultados, definida como uma mensagem. Uma mensagem com os valores possíveis de qualquer variável aleatória pode ser escrita em uma sequência de bits (ainda considerando os valores possíveis do bit como o conjunto $\{0, 1\}$). Tomando como exemplo o conjunto $\{a, b, c, d\}$ como os possíveis resultados de uma variável aleatória e, após uma sequência de medidas, a sequência de resultados

abadcaba

O conjunto $\{a, b, c, d\}$ pode então ser redefinido como:

$$\begin{aligned} a &\equiv 00 \\ b &\equiv 01 \\ c &\equiv 10 \\ d &\equiv 11 \end{aligned} \tag{2.4}$$

o que torna os valores possíveis $\{00, 01, 10, 11\}$ com a mesma distribuição de probabilidades anterior. Com esse conjunto como alfabeto, a mensagem anterior ficaria

0001001110000100 . . . ,

ou seja, uma sequência de bits.

A entropia de Shannon pode ser interpretada como a quantidade mínima de bits para reproduzir uma mensagem sem perda de informação relevante. Se uma mensagem for escrita com o alfabeto $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$, onde cada símbolo tem probabilidade $p = p_1, p_2, \dots, p_n$ de aparecer, esta mensagem pode ser escrita, sem perda relevante de informação, usando, em média, $H(p_1, p_2, \dots, p_n)$ bits. Desta forma, cada símbolo da mensagem possui em média H bits de informação. Este resultado é conhecido como teorema de Shannon para um canal de comunicação sem ruído. Considerando ainda o exemplo anterior, usando o conjunto $\{a, b, c, d\}$, com probabilidades $p_a = \frac{1}{2}$, $p_b = \frac{1}{4}$, $p_c = \frac{1}{8}$ e $p_d = \frac{1}{8}$, e usando a definição da Equação 2.4, com 2 bits por letra, tem-se:

$$\frac{1}{2} \cdot 2 + \frac{1}{4} \cdot 2 + \frac{1}{8} \cdot 2 + \frac{1}{8} \cdot 2 = 2 \text{ bits.}$$

Esse resultado é uma média da quantidade de bits usados para representar as letras do conjunto, ponderada pela probabilidade de cada letra ocorrer. De acordo com o teorema

de Shannon, entretanto, cada letra da mensagem possui, em média, $H(p_a, p_b, p_c, p_d)$ bits de informação. Usando a Equação 2.1, tem-se:

$$H(p_a, p_b, p_c, p_d) = - \left(\frac{1}{2}(-1) + \frac{1}{4}(-2) + \frac{1}{8}(-3) + \frac{1}{8}(-3) \right) = \frac{7}{4} \text{bits}.$$

A mensagem pode, assim, ser comprimida de forma a ser transmitida usando $\frac{7}{4}$ bits, em média. A codificação definida em Equação 2.4, portanto, utiliza mais recursos que o mínimo previsto pela teoria, não sendo a mais eficiente. É possível redefinir o conjunto como

$$\begin{aligned} a &\equiv 0 \\ b &\equiv 10 \\ c &\equiv 110 \\ d &\equiv 111 \end{aligned}$$

e calcular $H(p_a, p_b, p_c, p_d)$ para esse conjunto como:

$$\frac{1}{2} \cdot 1 + \frac{1}{4} \cdot 2 + \frac{1}{8} \cdot 3 + \frac{1}{8} \cdot 3 = \frac{7}{4} \text{bits}$$

Sendo esse valor a média ponderada da quantidade de bits usado por cada letra. Este algoritmo é chamado de Codificação de Huffman (HUFFMAN, 1952).

2.1.2 Entropia Conjunta

A entropia pode ser calculada para diferentes tipos de distribuição de probabilidade. A probabilidade conjunta quantifica a possibilidade de ocorrerem dois eventos $x \in X$ e $y \in Y$ independentes simultaneamente, onde $X = \{x, A_X, P_X\}$ e $Y = \{y, A_Y, P_Y\}$. $\{p(x, y), x \in A_X, y \in A_Y\}$ possui as propriedades de $0 \leq p(x, y) \leq 1, \forall (x, y) \in X \times Y$, bem como a propriedade de completudeza

$$\sum_{x,y} p(x, y) = 1. \quad (2.5)$$

A entropia conjunta é expressa conforme a Equação 2.1, substituindo $p(x)$ por $p(x, y)$,

$$H(X, Y) = - \sum_{x,y} p(x, y) \log p(x, y) \quad (2.6)$$

que tem como propriedade a simetria, isto é, $H(X, Y) = H(Y, X)$, herdada da interseção de probabilidade $P(A \cap B) = P(B \cap A)$. Para mais de duas variáveis aleatórias a entropia conjunta é

$$H(X_1, X_2, \dots, X_n) = - \sum_{x_1} \sum_{x_2} \dots \sum_{x_n} p(x_1, x_2, \dots, x_n) \log p(x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (2.7)$$

Pode-se interpretar como distribuição conjunta de probabilidade a possibilidade de surgirem pares de resultados, como aa , ab ou ac , por exemplo. Para variáveis aleatórias X e Y independentes as probabilidades conjuntas também são independentes, ou seja, $p(x, y) = p(x) \cdot p(y)$, logo

$$\begin{aligned}
H(X, Y) &= - \sum_{x,y} p(x, y) \log p(x, y) \\
&= - \sum_{x,y} p(x) p(y) \log [p(x) p(y)] \\
&= - \sum_{x,y} p(x) p(y) [\log p(x) + \log p(y)] \\
&= - \sum_{x,y} p(x) p(y) \log p(x) - \sum_{x,y} p(x) p(y) \log p(y) \\
&= - \sum_x p(x) \log p(x) - \sum_y p(y) \log p(y) \\
&= H(X) + H(Y),
\end{aligned} \tag{2.8}$$

que mostra que a entropia é aditiva para variáveis aleatórias independentes.

2.1.3 Entropia Condicionada e Entropia Condicional

A entropia de uma variável aleatória X , condicionada pelo conhecimento de uma outra variável aleatória Y , mede a incerteza de X quando Y é conhecida. Essa ideia pode ser formulada considerando o cálculo da entropia de X condicionada a um valor específico, isto é, $Y = y$. As probabilidades condicionais $\{p(x|y), x \in A_X\}$ podem ser usadas na definição original de entropia pois verificam as propriedades básicas de probabilidade $0 \leq p(x|y) \leq 1$ e $\sum_x p(x|y) = 1, \forall y \in A_Y$. A entropia de X condicionada a $Y = y$ é

$$H(X|Y = y) = - \sum_x p(x|y) \log p(x|y). \tag{2.9}$$

A entropia condicional $H(X|Y)$ é determinada calculando o valor esperado da entropia condicionada sobre os valores y . Como $p(x|y) = \frac{p(x,y)}{p(y)}$, pode-se escrever

$$\begin{aligned}
H(X|Y) &= \sum_y p(y) H(X|Y = y) \\
&= - \sum_{x,y} p(x, y) \log p(x|y) \\
&= - \sum_{x,y} p(x, y) \log \frac{p(x, y)}{p(y)} \\
&= - \sum_{x,y} p(x, y) \log p(x, y) + \sum_{x,y} p(x, y) \log p(y) \\
&= H(X, Y) - H(Y).
\end{aligned} \tag{2.10}$$

A Equação 2.10 é importante, pois a expressão da entropia condicional quântica não pode ser obtida diretamente dessa expressão por analogia, como visto na seção 2.2.

Uma das propriedades da entropia condicional $H(X|Y)$ é a positividade, isto é, $H(X|Y) \geq 0$, ou seja, o fato de a entropia de X ser condicionada aos valores de Y não pode perder o sentido de ganho de informação, pois o conhecimento sobre a variável X só pode aumentar com as informações da variável Y . Essa propriedade pode ser verificada analisando a Equação 2.10, pois $\log p(x|y) \leq 0$, $0 \leq p(x|y) \leq 1$, sendo $p(x|y) = 1$ e $p(x|y) = 0$ probabilidades máxima e mínima, respectivamente.

Dado que a entropia condicional de X a Y depende das probabilidades $p(y)$, e a entropia condicional de Y a X das probabilidades $p(x)$, e sendo essas arbitrárias entre si, $H(X|Y) \neq H(Y|X)$. A entropia conjunta pode ser relacionada com a entropia condicional fazendo

$$H(X, Y) = H(X|Y) + H(Y) = H(Y|X) + H(X). \quad (2.11)$$

Essa conexão é chamada regra da cadeia e pode ser usada para determinar a entropia conjunta quando se conhece a distribuição da probabilidade condicional e a distribuição da probabilidade do símbolo que condiciona o resultado da fonte.

2.1.4 Informação Mútua

Com uma permutação na Equação 2.11, pode-se obter uma outra quantidade da Teoria da Informação: a Informação Mútua. A informação mútua do par X e Y é dada por

$$I(X : Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y) = H(X) - H(X|Y) = H(Y) - H(Y|X) \quad (2.12)$$

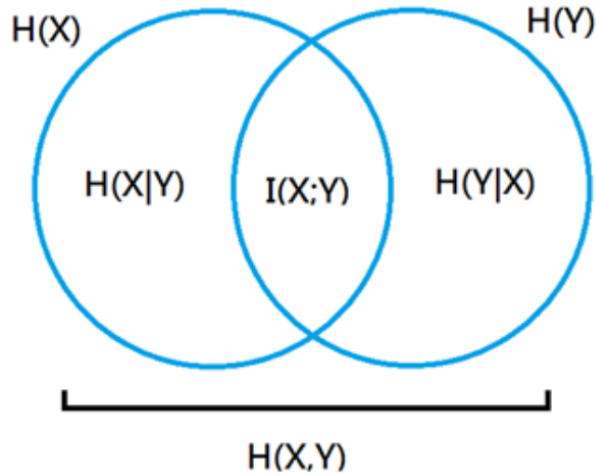
que mede a quantidade de informação em comum entre as duas variáveis aleatórias X e Y . Essa expressão é obtida somando as entropias de X e Y e subtraindo a entropia conjunta entre as duas variáveis, que é somada duas vezes. Essa correlação pode ser interpretada como a redução de incerteza de X devido ao conhecimento de Y . As relações entre entropia e informação mútua são expressas pelo diagrama da Figura 4, sendo a entropia de X o círculo à esquerda, a de Y o círculo à direita, a informação mútua a interseção da entropia dos dois e a entropia conjunta sua união.

2.1.5 Entropia Relativa

Para medir a proximidade entre duas funções de distribuição de probabilidade de uma variável aleatória é usada a entropia relativa, que é uma medida de divergência (chamada Divergência de Kullback-Leibler) de duas funções de distribuição de probabilidade, $p(x)$ e $q(x)$, em relação ao mesmo conjunto de índices x . A entropia relativa é dada por

$$H(p(x) \| q(x)) \equiv \sum_x p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} = -H(X) - \sum_x p(x) \log q(x), \quad (2.13)$$

Figura 4 – Diagrama das relações entre entropia e informação mútua.



Fonte: Santos Ferreira (2015).

onde, por definição, $q(x) \rightarrow 0 \Rightarrow -p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} \rightarrow +\infty$, se $p(x) > 0$, ou seja, o evento com probabilidade $p(x)$ ocorre e o evento com probabilidade $q(x)$ não.

Da entropia relativa surge um importante teorema utilizado para provar vários resultados da teoria da informação, denominado Desigualdade de Informação. Segundo esse teorema, a entropia relativa é não negativa, isto é,

$$H(p(x) \| q(x)) \geq 0, \quad (2.14)$$

com igualdade se, e somente se, $p(x) = q(x), \forall x$. A prova do teorema vem da desigualdade $\log x = \frac{\ln x}{\ln 2} \leq x - 1$, pois com $x = \frac{1}{t}$, tem-se

$$\frac{1}{\ln 2} (\ln 1 - \ln t) \leq \frac{1}{t} - 1 \Rightarrow \frac{\ln t}{\ln 2} \geq 1 - \frac{1}{t}. \quad (2.15)$$

Usando a Equação 2.15, conclui-se que

$$\begin{aligned} H(p(x) \| q(x)) &= \sum_x p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} \\ &= \frac{1}{\ln 2} \sum_x p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)} \\ &\geq \sum_x p(x) \left(1 - \frac{q(x)}{p(x)}\right) \\ &= \sum_x (p(x) - q(x)) \\ &= (1 - 1) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Essa igualdade ocorre se, e somente se, $q(x) = p(x), \forall x$.

A informação mútua pode ser escrita como uma desigualdade de informação, usando as funções de distribuição de probabilidade das fontes conjuntas de informação X e Y (Equação 2.12), sendo a informação mútua a divergência entre a densidade conjunta $p(x, y)$ e o produtório das marginais $p(x)$ e $p(y)$

$$I(X : Y) = \sum_{x,y} p(x, y) \log \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)}, \quad (2.17)$$

assim, a informação mútua pode ser escrita como uma entropia relativa,

$$I(X : Y) = \sum_{x,y} p(x, y) \log \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)} = H(p(x, y) \| p(x)p(y)), \quad (2.18)$$

onde a variável aleatória X tem distribuição de probabilidade conjunta $p(x, y)$ e Y tem $p(x)p(y)$. A informação mútua é, portanto, positiva,

$$I(X : Y) \geq 0, \quad (2.19)$$

com igualdade apenas no caso de independência entre as variáveis aleatórias.

A Equação 2.19 também é conhecida como subaditividade da entropia quando é escrita da forma

$$H(X, Y) \leq H(X) + H(Y), \quad (2.20)$$

e evidencia que a entropia conjunta de duas variáveis aleatórias X e Y é menor que a soma das entropias de cada uma dessas variáveis. A igualdade ocorre com X e Y independentes entre si. Outro resultado obtido a partir da desigualdade de informação é que a entropia de uma variável X possui um máximo, que depende da quantidade de símbolos que a fonte possui.

2.2 Entropia de von Neumann

Conforme visto na seção anterior, a entropia de Shannon quantifica a incerteza, ou conteúdo informativo, associada à distribuição de probabilidade. No caso quântico a entropia tem um papel muito similar, pois determina a incerteza sobre um sistema quântico, substituindo-se as distribuições de probabilidades pelos operadores densidade que descrevem sistemas quânticos. Um caso clássico associa um conjunto de probabilidades $\{p_j\}_{j=1}^n$ a um conjunto de símbolos aleatórios $\{x_i\}_{i=1}^n$, enquanto no quântico o operador densidade, $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$, é criado a partir de uma mistura estatística que associa $\{p_j\}_{j=1}^n$ a um conjunto de estados aleatórios $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^n$, que substituem os símbolos aleatórios. A particularidade do estado quântico surge pelo fato dos estados $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^n$ não serem, obrigatoriamente, ortogonais, o que faz com que, além da incerteza clássica, exista uma incerteza quântica associada à capacidade de distinção dos estados não ortogonais. A

entropia sobre um sistema quântico descrito por um operador densidade ρ é determinada como

$$S(\rho) \equiv -tr(\rho \log \rho), \quad (2.21)$$

condicionado à Equação 2.2.

Como visto no Capítulo 1 um operador densidade, por ser hermitiano e positivo, pode ser escrito em uma base ortogonal, onde os autovalores λ_i representam a probabilidade do estado ter sido preparado no estado $|e_i\rangle$. Dessa forma, a entropia de von Neumann, se λ_i são os autovalores de ρ , pode ser definida como:

$$\begin{aligned} S(\rho) &= - \sum_j \langle e_j | (\rho \log \rho) | e_j \rangle \\ &= - \sum_j \langle e_j | \sum_l \lambda_l | e_l \rangle \langle e_l | \log \left(\sum_k \lambda_k | e_k \rangle \langle e_k | \right) | e_j \rangle \\ &= - \sum_{jkl} \langle e_j | \lambda_l | e_l \rangle \langle e_l | e_k \rangle \log \lambda_k \langle e_k | e_j \rangle \\ &= - \sum_{kl} \langle e_j | \underbrace{\sum_j | e_j \rangle \langle e_j |}_{\mathbb{1}} \lambda_l | e_l \rangle \underbrace{\langle e_l | e_k \rangle}_{\delta_{lk}} \log \lambda_k \\ &= - \sum_i \lambda_i \log \lambda_i, \end{aligned} \quad (2.22)$$

com λ_i sendo as probabilidades da ocorrência de cada estado possível. Essa forma de entropia será a mais usada pela sua praticidade, pois a dificuldade se resume em descobrir os autovalores do operador densidade em sua representação ortogonal.

O valor máximo possível para a entropia de um sistema depende da dimensão do espaço de estados para esse sistema. Considerando um sistema com distribuição equiprovável entre os possíveis estados medíveis $\rho = \frac{\mathbb{1}}{n}$ onde n é a dimensão do espaço do estado, a entropia fica

$$S\left(\rho = \frac{\mathbb{1}}{n}\right) = - \sum_i \lambda_i \log \lambda_i = - \sum_i \frac{1}{n} \log \frac{1}{n} = \frac{n}{n} \log \frac{1}{n} = \log n. \quad (2.23)$$

Quando o operador densidade é formado por estados com igual probabilidade de ocorrência $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n = \frac{1}{n}$, diz-se que esse operador está em um estado maximamente misto.

2.2.1 Entropia Quântica Relativa

A Entropia Quântica Relativa é muito útil para o estudo da Entropia Quântica, no sentido de ferramenta de prova das propriedades da entropia. A entropia relativa nesse contexto é análoga ao caso clássico substituindo as distribuições de probabilidade pelos operadores densidade ρ e σ . Dessa forma, a entropia relativa entre ρ e σ é definida por:

$$S(\rho||\sigma) \equiv tr(\rho \log \rho) - tr(\rho \log \sigma). \quad (2.24)$$

Um resultado importante da entropia relativa é o fato de, como no caso clássico, ser positiva.

Segundo o teorema conhecido como Desigualdade de Klein,

$$S(\rho||\sigma) \geq 0, \quad (2.25)$$

com igualdade se, e somente se, $\rho = \sigma$. Esse teorema pode ser provado fazendo-se $\rho = \sum_i p_i |i\rangle \langle i|$ e $\sigma = \sum_j q_j |j\rangle \langle j|$ decomposições dos operadores densidade ρ e σ . Usando a definição da entropia relativa pode-se escrever:

$$S(\rho||\sigma) = \sum_i (\langle i| \rho \log \rho - \rho \log \sigma |i\rangle) = \sum_i p_i \log p_i - \sum_i \langle i| \rho \log \sigma |i\rangle. \quad (2.26)$$

Como p_i é um autovalor do operador ρ , pode-se fazer a substituição $\langle i| \rho = p_i \langle i|$ e, usando a propriedade $f(\sigma) = \sum_j |j\rangle f(q_j) \langle j|$ (obtido por meio da expansão em série de Taylor de σ), reescrever o último termo da equação como

$$\langle i| \log \sigma |i\rangle = \langle i| \left(\sum_{ij} \log(q_j) |j\rangle \langle j| \right) |i\rangle = \sum_{ij} p_i \log(q_j) \langle i|j\rangle \langle j|i\rangle.$$

Renomeando a amplitude da probabilidade como $P_{ij} = \langle i|j\rangle \langle j|i\rangle$, este termo pode ser reescrito

$$\sum_{ij} p_i \log(q_j) P_{ij}.$$

Dessa forma, a entropia relativa fica:

$$S(\rho||\sigma) = \sum_i p_i \left(\log(p_i) - \sum_j P_{ij} \log(q_j) \right), \quad (2.27)$$

onde $P_{ij} = |\langle i|j\rangle|^2 \geq 0$ e as somas marginais $\sum_i P_{ij} = \langle j| (\sum_i |i\rangle \langle i|) \langle j| = 1$ e, da mesma forma, $\sum_j P_{ij} = 1$. Devido à concavidade da função $\log(x)$, tem-se que:

$$\sum_j P_{ij} \log(q_j) \geq \log(r_i),$$

onde $r_i \equiv \sum_j P_{ij} q_j$, assim pode-se escrever:

$$\begin{aligned} S(\rho||\sigma) &\geq \sum_i p_i \log \left(\frac{p_i}{\sum_j P_{ij} q_j} \right) \\ S(\rho||\sigma) &\geq \sum_i p_i \log \left(\frac{p_i}{r_i} \right). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Essa equação possui a forma da entropia relativa clássica na Equação 2.16 e da não negatividade da entropia clássica, portanto:

$$S(\rho||\sigma) \geq 0$$

com igualdade se, e somente se, $p_i = r_i, \forall i$, e se P_{ij} for uma matriz de permutação.

2.2.2 Propriedades Básicas da Entropia

Algumas demonstrações das propriedades da entropia são necessárias por serem úteis para demonstrações seguintes no estudo da teoria da informação quântica (MIRANDA, 2015).

1. A entropia é positiva, com valor zero se, e somente se, o estado for puro.

O que é facilmente visível dada a definição da entropia

$$S(\rho) = - \sum_x \lambda_x \log \lambda_x.$$

O fato de um estado puro ter um autovalor igual a 1 e o restante igual a 0 faz com que os logaritmos se tornem zero, fazendo com que a entropia seja zero.

2. Em um espaço d -dimensional a entropia máxima é $\log d$, o que ocorre quando o sistema estiver em um estado maximamente misto $\frac{\mathbb{1}}{d}$.

Usando a entropia relativa entre os estados ρ e $\sigma \equiv \frac{\mathbb{1}}{d}$, tem-se:

$$S(\rho||\sigma) = \text{tr}(\rho \log \rho) - \text{tr}\left(\rho \log \frac{\mathbb{1}}{d}\right) = -S(\rho) - \sum_i \langle i|\rho \log \frac{\mathbb{1}}{d}|i\rangle$$

e, usando $\langle i|\rho = p_i \langle i|$:

$$S(\rho||\sigma) = -S(\rho) - \sum_i p_i \langle i|i\rangle (\log \mathbb{1} - \log d) = -S(\rho) + \log d \geq 0.$$

3. Supondo um sistema composto AB no estado puro, então $S(A) = S(B)$.

Conforme visto, a entropia quântica é calculada usando como argumento da função os autovalores dos operadores densidade A e B . Da decomposição de Schmidt, sabe-se que existe uma base ortogonal para o sistema AB de modo que ambos subsistemas compartilham os mesmos autovalores. Assim, sendo os autovalores de ρ^A os mesmos de ρ^B , $S(A) = S(B)$.

4. Supondo que p_i são probabilidades e os estados ρ_i têm base no subespaço ortogonal, então $S(\sum_i p_i \rho_i) = H(p_i) + \sum_i p_i S(\rho_i)$.

Partindo da entropia de um estado $\sum_i p_i \rho_i$, pode-se considerar o estado $\sum_i p_i \rho_i = \sum_i p_i \sum_j |j\rangle \lambda_i^j \langle j|$ onde p_i é a probabilidade de ocorrência do estado ρ_i . Com base nos autovalores do operador, a entropia pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} S\left(\sum_i p_i \rho_i\right) &= \sum_{ij} p_i \lambda_i^j \log(p_i \lambda_i^j) \\ &= \sum_{ij} p_i \lambda_i^j \log p_i - \sum_{ij} p_i \lambda_i^j \log \lambda_i^j \\ &= \sum_i p_i \log p_i \sum_j \lambda_i^j - \sum_i p_i \sum_j \lambda_i^j \log \lambda_i^j \\ &= H(p_i) + \sum_j p_i S(\rho_i). \end{aligned} \tag{2.29}$$

5. **Entropia conjunta: supondo p_i probabilidades, $|i\rangle$ estados ortogonais para um sistema A e ρ_i o operador de outro sistema B , então:**

$$S\left(\sum_i p_i |i\rangle\langle i| \otimes \rho_i\right) = H(p_i) + \sum_i p_i S(\rho_i).$$

Para isso, considera-se $\rho_i = \sum_j |j\rangle\langle j| \lambda_i^j$ e

$$p_i |i\rangle\langle i| \otimes |j\rangle\langle j| \lambda_i^j = |ij\rangle p_i \lambda_i^j \langle ij| = \rho_{AB}.$$

Então pode-se escrever a entropia do estado ρ_{AB} como:

$$S(\rho_{AB}) = \rho_{AB} \log \rho_{AB} = \sum_{ij} p_i \lambda_i^j \log(p_i \lambda_i^j).$$

2.2.3 Discórdia Quântica

Conforme demonstrado na subseção 1.6.2 os sistemas físicos descritos pela mecânica quântica podem estar quanticamente correlacionados, tal correlação sendo frequentemente descrita como emaranhamento e resultando na impossibilidade de alguns sistemas quânticos serem caracterizados por estados separáveis. Porém, o emaranhamento não é a única forma possível de correlação quântica entre sistemas. Outra medida das correlações entre partículas que estão em desacordo com as leis da física clássica foi proposta, denominada discórdia quântica (OLLIVIER; ZUREK, 2001).

A discórdia quântica pode assumir valores diferentes das medidas de emaranhamento, o que pode ser verificado considerando sistemas mistos. Desta forma, em alguns sistemas podem existir correlações quânticas mesmo que o sistema esteja em um estado separável. Assim como o emaranhamento, acredita-se que a discórdia quântica possa ser usada na melhoria de sistemas usados no processamento de informação.

O conceito de discórdia quântica vem da ideia de informação mútua entre sistemas. Em sistemas quânticos a informação mútua, quando existir, não é composta somente de correlações clássicas. A discórdia vem da generalização da Equação 2.12 que calcula a informação mútua entre duas variáveis aleatórias de duas formas distintas para sistemas quânticos. A primeira parte da Equação 2.12 leva em consideração somente a incerteza nos sistemas, sem quantificar o conhecimento de qualquer uma das partes, enquanto a segunda considera medidas locais em uma das partes, ou seja, o conhecimento de uma das partes.

A equação que resulta na informação mútua entre sistemas quânticos usando somente a incerteza ao sistema pode ser obtida generalizando a Equação 2.12, porém, usando a entropia de von Neumann em vez da entropia de Shannon. Desta forma, a quantidade de informação comum a dois sistemas quânticos pode ser calculada como

$$S(A : B) = S(A) + S(B) - S(A, B). \quad (2.30)$$

As entropias $S(A)$ e $S(B)$ são calculadas usando a Equação 2.21 e as matrizes ρ_A e ρ_B que caracterizam ambas as partes do sistema. A entropia $S(A, B)$ é calculada usando ρ_{AB} que caracteriza o sistema como um todo e é o equivalente, em sistemas quânticos, à entropia conjunta descrita pela Equação 2.6, onde foi considerado um par de variáveis aleatórias. As entropias $S(A)$, $S(B)$ e $S(A, B)$ medem respectivamente a incerteza aos sistemas A , B e ao sistema total $(A + B)$.

A generalização para a Equação 2.12 que resulta na informação mútua usando entropia condicional não é tão direta quanto a anterior. Aqui deve-se considerar o conhecimento de uma das partes do sistema $(A + B)$, ou seja, um conjunto de medidas sobre o sistema. O processo de medida em sistemas quânticos difere de sistemas clássicos. Dois fatores deste processo são de importância nesta generalização. Primeiro, deve-se observar que o resultado de uma medida varia conforme o modo com que a medida é realizada. Isto equivale a dizer que o resultado de uma medida varia com a base usada em sua representação. Como segundo fator, há o fato de uma medida poder alterar o estado do sistema. Nesta generalização, consideram-se medidas locais e em uma das partes do sistema composto, bem como a perturbação no estado do sistema provocada pelo processo de medida.

Aqui, será considerado um sistema $(A + B)$ e um aparato medidor que age localmente no sistema B sendo que este pode ser representado por medidas projetivas. As medidas serão representadas pelos operadores Π_B . O conjunto de todas as medidas projetivas é dado por $\{\Pi_B^i\}$ onde o índice i é usado para diferenciar os operadores. Desta forma, o estado do sistema total $(A + B)$ logo após a medida de Π_B^i é dado por:

$$\rho_{AB}^i = \frac{(\mathbb{1} \otimes \Pi_B^i) \rho_{AB} (\mathbb{1} \otimes \Pi_B^i)}{\text{tr} [(\mathbb{1} \otimes \Pi_B^i) \rho_{AB} (\mathbb{1} \otimes \Pi_B^i)]},$$

onde o fator de normalização $\text{tr} [(\mathbb{1} \otimes \Pi_B^i) \rho_{AB} (\mathbb{1} \otimes \Pi_B^i)]$ é a probabilidade de o estado ρ_{AB}^i ocorrer. Assim pode-se definir $p_i \equiv \text{tr} [(\mathbb{1} \otimes \Pi_B^i) \rho_{AB} (\mathbb{1} \otimes \Pi_B^i)]$. O análogo quântico à entropia condicional é dado pela entropia de von Neumann do sistema após a medida Π_B^i . Assim, tem-se:

$$S(A|\Pi_B^i) = \sum_i p_i S(\rho_{AB}^i). \quad (2.31)$$

Da definição acima, a Equação 2.12 pode ser generalizada para sistemas quânticos como:

$$J(A : B) = S(\rho_A) - S(A|\Pi_B^i). \quad (2.32)$$

Esta equação depende de qual projetor Π_B^i é usado, isto é, depende de qual medida será feita. Assim, surge a questão de qual dos operadores do conjunto $\{\Pi_B^i\}$ deve ser usado no cálculo. Henderson e Vedral (2001) propuseram que a equação acima deve ser maximizada considerando todo o conjunto dos projetores, ou seja, deve-se considerar o projetor que resulte no maior valor para $J(A, B)$. O máximo valor para $J(A, B)$ tomado sobre todas as possíveis medidas é interpretado como uma medida das correlações clássicas entre os dois sistemas. Desta forma, neste caso, o quanto os dois sistemas A e B estão correlacionados

classicamente é dado pelo máximo de informação acessível de A por medidas locais no sistema B . Através da Equação 2.32 as correlações clássicas para o sistema ρ_{AB} são calculadas por:

$$J_{AB}^{\leftarrow} = \max_{\Pi_B^i} \{S(\rho_A) - S(A|\Pi_B^i)\}, \quad (2.33)$$

onde J_{AB}^{\leftarrow} quantifica as correlações clássicas entre A e B . A equação acima não é simétrica, ou seja, geralmente $J_{AB}^{\leftarrow} \neq J_{BA}^{\leftarrow}$. Esta equação é a generalização da Equação 2.12 obtida para sistemas clássicos.

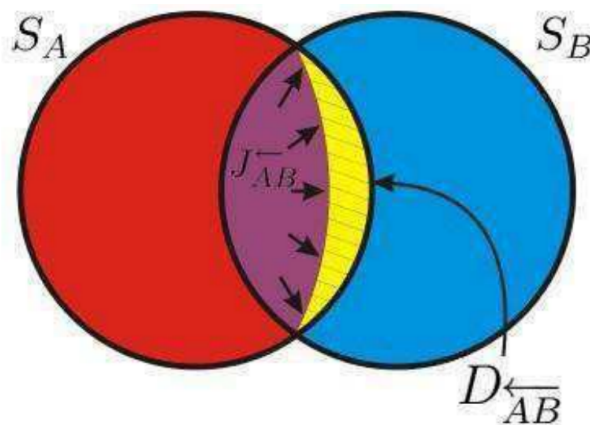
Quando considerados, na subseção 2.1.4, sistemas clássicos, a informação mútua foi descrita como uma medida de quanto dois sistemas estão correlacionados classicamente. No caso clássico há duas formas de se calcular este valor, no entanto, em sistemas quânticos a situação é diferente. A informação mútua dada pela Equação 2.30 também mede o quanto os sistemas estão correlacionados, mas esta correlação não é puramente clássica e a Equação 2.30 e a Equação 2.33 não são equivalentes. Neste caso tem-se que $J_{AB}^{\leftarrow} \leq S(A : B)$.

A Equação 2.30 mede a informação mútua total do sistema. Isto significa que ela quantifica a soma das correlações clássicas e quânticas, ou seja: $S(A : B) = \text{Correlações Clássicas} + \text{Correlações Quânticas}$. Sabendo que J_{AB}^{\leftarrow} quantifica o total de correlação clássica existente no sistema, pode-se calcular o quanto os dois sistemas estão quanticamente correlacionados usando a Equação 2.30 e a Equação 2.33, como:

$$D_{AB}^{\leftarrow} = S(A : B) - J_{AB}^{\leftarrow}, \quad (2.34)$$

onde D_{AB}^{\leftarrow} mede as correlações quânticas totais entre os sistemas. Esta grandeza é denominada discórdia quântica. A relação entre informação mútua, correlação clássica e correlação quântica pode ser representada usando um diagrama de Venn. A Figura 5 mostra esta representação.

Figura 5 – Diagrama de Venn para sistemas quânticos.



Fonte: Pinto (2014).

3 Computação Quântica

Neste capítulo serão apresentados alguns conceitos de computação quântica, assim como algoritmos baseados neles e como estes se comparam com seus análogos clássicos, quando existirem.

3.1 Portas Lógicas Quânticas

Assim como as portas lógicas clássicas podem operar sobre um bit clássico, há portas lógicas que operam sobre os qubits, tirando vantagem de suas propriedades únicas. A seguir serão apresentadas algumas destas portas lógicas para um ou múltiplos qubits.

3.1.1 Portas de um qubit

No caso clássico, a única porta lógica não trivial para um bit é a porta *NOT*, cuja operação é definida pela tabela verdade na qual $0 \rightarrow 1$ e $1 \rightarrow 0$, isto é, os estados 0 e 1 são trocados. Um análogo quântico para a porta *NOT* pode ser definido de modo que leve o estado $\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ para $\alpha |1\rangle + \beta |0\rangle$. A porta *NOT* quântica pode ser representada pela matriz

$$X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.1)$$

Se o estado quântico $\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ for escrito como um vetor

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}, \quad (3.2)$$

com a parte superior correspondendo à amplitude para $|0\rangle$ e a inferior à amplitude para $|1\rangle$, então a saída da porta *NOT* quântica é

$$X \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Assim, portas lógicas de um único qubit podem ser descritas por matrizes dois por dois que mantenham a condição de normalização do estado ($|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ para um estado $\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$) depois de feita a operação (NIELSEN; CHUANG, 2010). Para isto basta que a matriz U que descreve a porta lógica seja unitária, isto é, $U^\dagger U = \mathbb{1}$, onde U^\dagger é o adjunto de U e $\mathbb{1}$ é a matriz identidade dois por dois. Desta forma, qualquer matriz unitária é uma porta quântica válida.

Uma consequência disto é que há várias portas lógicas que atuam sobre um qubit. A porta *NOT* é chamada mais comumente de X por ser uma das matrizes de Pauli. As

matrizes de Pauli são operadores que levam um estado a seu oposto em um dos eixos da Esfera de Bloch (Figura 3). Então, da mesma forma que X inverte a posição do estado em relação ao eixo x , há ainda

$$Y \equiv \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.4)$$

que leva $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ em $i\alpha|1\rangle - i\beta|0\rangle$ e

$$Z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (3.5)$$

que deixa $|0\rangle$ inalterado e muda o sinal de $|1\rangle$ para $-|1\rangle$. Essas matrizes são também chamadas σ_x , σ_y e σ_z , respectivamente (YANOFSKY; MANNUCCI, 2008). Há ainda a porta Hadamard,

$$H \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

Esta porta leva $|0\rangle$ para $\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$, entre $|0\rangle$ e $|1\rangle$, e $|1\rangle$ para $\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}$, também entre $|0\rangle$ e $|1\rangle$. A porta Hadamard pode ser representada através de matrizes de Pauli como

$$H = \frac{\sigma_x + \sigma_z}{\sqrt{2}}. \quad (3.7)$$

3.1.2 Portas de múltiplos qubits

A porta lógica quântica de múltiplos qubits mais comumente usada é a **controlled-NOT** ou *CNOT*. Esta porta tem como entrada dois qubits, chamados qubit de controle e qubit alvo, respectivamente. A porta *CNOT* pode ser representada pela matriz U_{CN} :

$$U_{CN} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.8)$$

A porta faz com que, se o qubit de controle for 0, o alvo permanece igual e se for 1, o alvo é invertido. Assim:

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle; |01\rangle \rightarrow |01\rangle; |10\rangle \rightarrow |11\rangle; |11\rangle \rightarrow |10\rangle. \quad (3.9)$$

A porta *CNOT* também pode ser descrita como uma generalização da porta *XOR* clássica, já que a ação da porta pode ser resumida como $|A, B\rangle \rightarrow |A, B \oplus A\rangle$, onde \oplus é a adição modulo dois, que é exatamente o que a porta *XOR* faz (NIELSEN; CHUANG, 2010).

Um resultado teórico importante é que, para o caso clássico, qualquer função de bits pode ser calculada somente a partir de portas lógicas *NAND*, que é portanto conhecida como porta **universal**. Embora haja várias outras portas lógicas quânticas, as portas de

um qubit e a porta *CNOT* são protótipos para todas as demais devido à sua universalidade: *qualquer porta de múltiplos qubits pode ser composta de CNOT e portas de um qubit* (NIELSEN; CHUANG, 2010).

3.2 Teorema da Não Clonagem

É possível copiar facilmente um bit clássico usando a porta *CNOT*, por exemplo (com o bit de controle 0). Isto não pode ser feito, no entanto, com um estado quântico, o que pode ser provado facilmente: supondo que se queira copiar o estado puro $|\psi\rangle$ (chamado de *dado*) para um estado puro inicial $|s\rangle$ (chamado *alvo*), sendo o estado inicial da máquina

$$|\psi\rangle \otimes |s\rangle. \quad (3.10)$$

Alguma evolução unitária U então afeta o procedimento de cópia, idealmente,

$$|\psi\rangle \otimes |s\rangle \xrightarrow{U} U(|\psi\rangle \otimes |s\rangle) = |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle. \quad (3.11)$$

Supondo que este procedimento de cópia funciona para dois estados puros particulares, $|\psi\rangle$ e $|\varphi\rangle$, tem-se

$$U(|\psi\rangle \otimes |s\rangle) = |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle \quad (3.12)$$

$$U(|\varphi\rangle \otimes |s\rangle) = |\varphi\rangle \otimes |\varphi\rangle. \quad (3.13)$$

Tomando o produto interno destas duas equações, tem-se

$$\langle\psi|\varphi\rangle = (\langle\psi|\varphi\rangle)^2. \quad (3.14)$$

Porém, $x = x^2$ tem apenas duas soluções, $x = 0$ e $x = 1$, de modo que ou $|\psi\rangle = |\varphi\rangle$ (e $\langle\psi|\varphi\rangle = 1$) ou $|\psi\rangle$ e $|\varphi\rangle$ são ortogonais (e $\langle\psi|\varphi\rangle = 0$). Assim, um aparelho de clonagem só pode clonar estados que sejam ortogonais um ao outro e, portanto, um dispositivo de clonagem quântica geral é impossível. Tal dispositivo não poderia, por exemplo, clonar tanto $|\psi\rangle = |0\rangle$ quanto $|\varphi\rangle = \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$, já que estes não são ortogonais (NIELSEN; CHUANG, 2010).

3.3 Teletransporte Quântico

Um dos algoritmos quânticos mais interessantes que não possui um análogo clássico é o teletransporte quântico. Devido às propriedades únicas do emaranhamento (subseção 1.6.2), é possível transferir um estado arbitrário de um qubit para outro de forma instantânea, independentemente da distância entre eles. Como resultado do teorema de não clonagem descrito na seção anterior, não é possível copiar o estado de um qubit qualquer. Isto significa que quando o qubit original é teletransportado para outro local, o estado do original será necessariamente destruído (YANOFSKY; MANNUCCI, 2008).

Para trabalhar com operações em qubits pode ser útil alternar entre as bases canônicas e não canônicas. O algoritmo de teletransporte age sobre dois qubits emaranhados, cuja base canônica óbvia é

$$\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}.$$

Uma base não canônica, chamada de base de Bell, é composta de quatro estados (chamados *estados de Bell* ou *maximamente emaranhados*) (YANOFSKY; MANNUCCI, 2008):

$$|\psi^+\rangle = \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (3.15)$$

$$|\psi^-\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (3.16)$$

$$|\phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (3.17)$$

$$|\phi^-\rangle = \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (3.18)$$

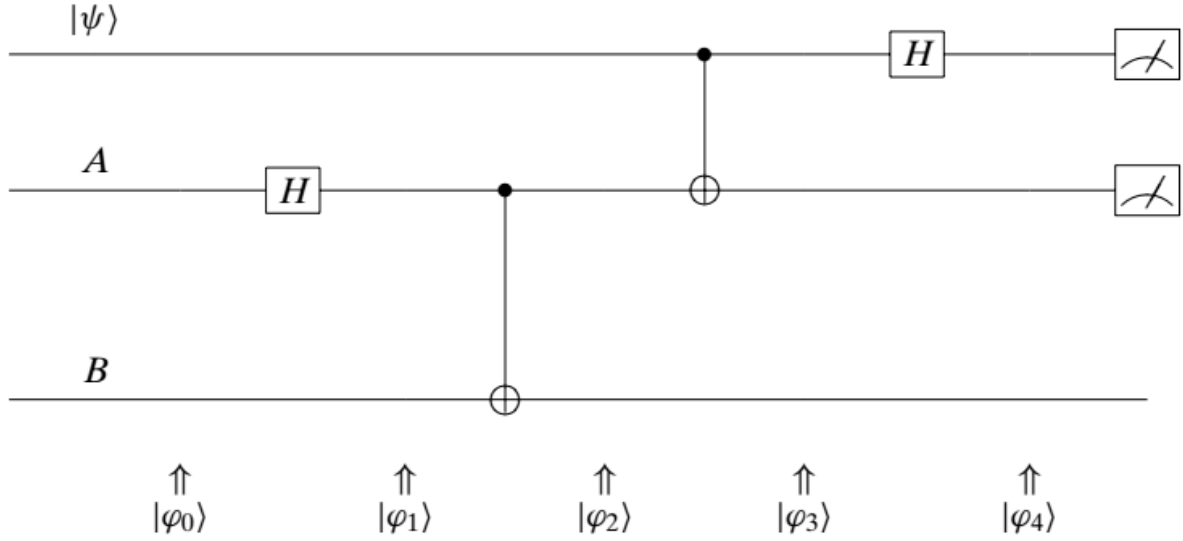
Para transformar a base canônica na base de Bell, aplica-se as portas Hadamard e *CNOT* (para agir sobre ambos qubits) sobre os elementos da base canônica. Este circuito quântico cria os elementos da base de Bell da seguinte forma:

$$|00\rangle \rightarrow |\phi^+\rangle, |01\rangle \rightarrow |\psi^+\rangle, |10\rangle \rightarrow |\phi^-\rangle, |11\rangle \rightarrow |\psi^-\rangle.$$

Com isso, é possível descrever o protocolo de teletransporte quântico (YANOFSKY; MANNUCCI, 2008).

Supondo que se queira teletransportar um estado arbitrário $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ de A para B . Inicialmente, dois qubits são formados como $|\phi^+\rangle$ e um é dado a A e outro a B . A Figura 6 representa este circuito. A caixa H representa a operação de Hadamard em um qubit (Equação 3.6) e as linhas ligando dois qubits são portas *CNOT* (Equação 3.8), com \bullet sendo o qubit de controle e \oplus o alvo. Seus estados são os seguintes:

Figura 6 – Circuito de Teletransporte Quântico.



Fonte: Yanofsky e Mannucci (2008).

$$|\varphi_0\rangle = |\psi\rangle \otimes |0_A\rangle \otimes |0_B\rangle = |\psi\rangle \otimes |0_A 0_B\rangle, \quad (3.19)$$

$$|\varphi_1\rangle = |\psi\rangle \otimes \frac{|0_A\rangle + |1_A\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |0_B\rangle, \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} |\varphi_2\rangle &= |\psi\rangle \otimes |\phi^+\rangle = |\psi\rangle \otimes \frac{|0_A 0_B\rangle + |1_A 1_B\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) \otimes \frac{|0_A 0_B\rangle + |1_A 1_B\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$|\varphi_3\rangle = \frac{\alpha |0\rangle (|0_A 0_B\rangle + |1_A 1_B\rangle) + \beta |1\rangle (|1_A 0_B\rangle + |0_A 1_B\rangle)}{\sqrt{2}}, \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} |\varphi_4\rangle &= \frac{\alpha (|0\rangle + |1\rangle) (|0_A 0_B\rangle + |1_A 1_B\rangle) + \beta (|0\rangle - |1\rangle) (|0_A 0_B\rangle + |1_A 1_B\rangle)}{2} \\ &= \frac{\alpha (|000\rangle + |011\rangle + |100\rangle + |111\rangle) + \beta (|010\rangle + |001\rangle - |110\rangle - |101\rangle)}{2}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

onde o estado $|\psi\rangle$ interage com o qubit emaranhado em A no estado $|\varphi_2\rangle$ para criar o estado $|\varphi_3\rangle$. Reagrupando as triplas $|xyz\rangle$ em termos de $|xy\rangle$, que está com A , tem-se

$$\begin{aligned} |\varphi_4\rangle &= \frac{1}{2} (|00\rangle (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) + |01\rangle (\beta |0\rangle + \alpha |1\rangle) + \\ &\quad |10\rangle (\alpha |0\rangle - \beta |1\rangle) + |11\rangle (-\beta |0\rangle + \alpha |1\rangle)). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Assim, o sistema de três qubits se encontra em uma superposição de quatro estados possíveis.

Então é feita a medida dos dois qubits em A para determinar em qual dos quatro estados possíveis o sistema colapsa. No momento da medida, os três qubits colapsam em

um dos quatro estados possíveis. Portanto, se A mede $|10\rangle$, o terceiro qubit (em B) está no estado $\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle$ (YANOFSKY; MANNUCCI, 2008). Há, então, dois problemas: A conhece este estado, mas B não e B tem $\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle$, não o $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ desejado.

Ambos os problemas têm uma única solução simples: A envia cópias de seus bits (os resultados das medidas, não qubits) para B que os utiliza para obter o estado original $|\psi\rangle$. Ou seja, se B recebe $|01\rangle$ de A , então sabe que seu qubit está no estado

$$\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ -\beta \end{bmatrix}$$

e, portanto, deve operar sobre o qubit com a seguinte matriz:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ -\beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = |\psi\rangle.$$

Especificamente, B deve aplicar as seguintes matrizes após receber informação de A :

$$\begin{aligned} |00\rangle &\Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \\ |01\rangle &\Rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \\ |10\rangle &\Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \\ |11\rangle &\Rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{3.25}$$

Aplicando a matriz, B tem o mesmo qubit que A tinha. Há alguns detalhes a se notar sobre este protocolo (YANOFSKY; MANNUCCI, 2008):

- A não tem mais $|\psi\rangle$, mas dois bits clássicos.
- Para teletransportar uma única partícula quântica, A precisa enviar dois bits clássicos através de um canal clássico. Sem eles, B não pode conhecer o estado que recebeu. Assim, mesmo que o emaranhamento permita o colapso instantâneo do estado, não é possível haver comunicação mais rápida que a velocidade da luz.
- α e β são números complexos arbitrários que satisfaçam $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, podendo ter uma expansão decimal infinita. Esta quantidade potencialmente infinita de informação passa de A para B através de dois bits. No entanto, esta quantidade de informação potencialmente infinita é passada como qubit para B e não tem utilidade até que seja medida e colapse em um bit.
- É possível discutir que chamar este protocolo de "teletransporte" é um exagero, afinal, nenhuma partícula foi movida de fato. Entretanto, do ponto de vista da mecânica quântica, duas partículas que tenham exatamente o mesmo estado quântico são, fisicamente, indistinguíveis e podem ser tratadas como se fossem a mesma.

Parte II

Sistemas Quânticos Abertos

4 Modelos de Sistemas Quânticos Abertos

Nos postulados apresentados na seção 1.4, bem como na generalização para o formalismo matricial, foi considerado um sistema quântico fechado. Sistemas fechados são sistemas completamente isolados do ambiente a seu redor. Na mecânica quântica pode-se preparar, através de um conjunto de medidas, um sistema isolado do ambiente, o que é chamado de sistema quântico isolado. Contudo, na prática, é impossível manter um sistema isolado do ambiente ao seu redor (PINTO, 2014). Assim, faz-se útil o estudo de sistemas quânticos abertos, ou seja, de sistemas onde há interação entre o sistema de interesse e o ambiente ao seu redor.

Quando considerados sistemas quânticos como meio de processamento ou armazenamento de informação a interação entre um sistema e o ambiente aparece na forma de ruído. Sabe-se que ruído não é algo inerente ao processamento de informação quântica. No processamento de informação clássica é necessário um meio físico para manipular informação, de forma que este meio também pode sofrer interação com o ambiente ao seu redor, o que é tratado pela teoria da informação como um processo de ruído clássico.

Em sistemas clássicos o ruído é caracterizado por uma inversão de bits. No processamento de informação clássica, a interação entre o sistema físico e o ambiente pode fazer com que um bit altere seu estado. Como não se tem a certeza que o ruído cause a mudança no estado de um bit, é descrita a probabilidade de isto ocorrer. Se, por exemplo, tem-se que o estado de um qubit é 0, um canal ruidoso pode fazer com que seu estado se altere para 1 e este fato ocorre com uma certa probabilidade. Assim, pode-se dizer que na ausência de ruído o sistema fica caracterizado por uma distribuição de probabilidade $\vec{p} = (p_0, p_1)$, onde p_0 é a probabilidade de ocorrer um bit com estado 0 e p_1 é a probabilidade de ocorrer um bit com estado 1. O ruído faz com que esta distribuição de probabilidades se altere, de forma que pode-se ter, após um processo ruidoso, uma segunda distribuição de probabilidades, $\vec{q} = (q_0, q_1)$, onde q_0 e q_1 representam respectivamente as probabilidades de ocorrer um bit com estado 0 ou com estado 1 após um processo ruidoso. Esta transformação pode ser representada por:

$$\vec{q} = E\vec{p}, \quad (4.1)$$

onde E é uma matriz que representa o ruído. A forma da matriz E depende do ambiente ao redor do sistema e de como é feita a interação entre o ambiente e o sistema utilizado como meio para o processamento da informação. O cálculo de E segue basicamente dois processos: encontrar um modelo que simule bem o ambiente e um modelo que simule de forma eficiente a interação do sistema com o ambiente (PINTO, 2014).

Quando um sistema quântico é considerado como meio para o processamento de informação, a transformação dada pela Equação 4.1 se torna ineficaz no estudo de ruídos. Isto

pode ser notado considerando, por exemplo, um sistema de n qubits. A representação deste sistema é dada pelos estados $|\psi_i\rangle = (a_i |0\rangle + b_i |1\rangle)$ que ocorrem com probabilidades p_i , $i = 1, \dots, n$. Considerando que este sistema entre em contato com o ambiente a interação pode mudar a distribuição de probabilidades p_i do sistema, mas também alterar a diferença de fase entre $|0\rangle$ e $|1\rangle$ de cada qubit, uma relação como a Equação 4.1 não é capaz de modelar as mudanças de fase. Nesta situação a transformação correta de um sistema quântico pode ser obtida usando o formalismo matricial. Assim, a transformação pode ser calculada como:

$$\rho' = \epsilon(\rho),$$

onde $\rho = \sum_i^n p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$. A transformação indicada acima não é exclusiva a sistemas abertos; um sistema fechado também pode ter o seu estado modificado.

O cálculo da transformação do estado de um sistema quântico devido a um processo ruidoso segue a mesma lógica usada para calcular a matriz E da Equação 4.1: é necessário um modelo que simule o ambiente e um modelo que simule a interação entre o sistema de interesse e o ambiente ao seu redor. Neste capítulo será mostrado como calcular ρ' considerando a interação entre o sistema quântico e o ambiente, usando o operador soma.

4.1 Operadores de Kraus

Uma forma de estudar sistemas abertos na mecânica quântica é considerando que o ambiente também é descrito pela mecânica quântica, ou seja, o ambiente também é um sistema quântico. Serão usadas as letras S e A para nomear respectivamente o sistema que se deseja estudar e o ambiente ao seu redor. Ao ambiente A , tem-se um espaço de Hilbert \mathbb{H}_A associado, que contém todos os seus estados possíveis, da mesma forma, há também os espaços vetoriais \mathbb{H}_S , associado ao sistema S e $\mathbb{H}_{SA} = \mathbb{H}_S \otimes \mathbb{H}_A$, associado ao sistema total ($S + A$).

O formalismo dos operadores soma é frequentemente apresentado fazendo uso de duas suposições. A primeira suposição é que o sistema principal e o ambiente partem de um estado produto: $\rho_S(0) \otimes \rho_A(0)$, onde $\rho_S(0)$ e $\rho_A(0)$ são respectivamente o estado inicial do sistema e do ambiente, ou seja, no início do processo o sistema de interesse é considerado totalmente isolado do ambiente. Esta suposição é motivada pelo fato de, ao se estudar objetos quânticos, o estado dever ser preparado, o que é feito através de um conjunto de medidas, que faz com que o sistema fique, por um breve instante, aproximadamente isolado do ambiente. A segunda suposição é que o sistema total ($S + A$) é um sistema isolado durante toda a dinâmica. Assim, a escolha do modelo para o ambiente deve ser feita de forma que estas suposições possam ser satisfeitas (PINTO, 2014).

Com a segunda suposição, garante-se que mesmo que haja correlações entre A e S , o sistema composto ($S + A$) continua sendo um sistema isolado. Desta forma, a evolução temporal do sistema total é obtida pela equação de Schrödinger (Equação 1.22). Fazendo

uso das suposições descritas acima, a dinâmica do sistema $(S + A)$ pode ser obtida por:

$$\rho_{SA}(t) = U [\rho_S(0) \otimes \rho_A(0)] U^\dagger, \quad (4.2)$$

onde U é um operador unitário que atua sobre o sistema composto. As matrizes densidade $\rho_S(0)$, $\rho_A(0)$ e $\rho_{SA}(t)$ caracterizam respectivamente os estados iniciais dos sistemas A e S e o estado do sistema total $(S + A)$ em um dado instante t .

Conhecendo o estado do sistema $(S + A)$ para um certo instante t é possível obter informação sobre o sistema S para esse instante. Isto é feito pela operação traço parcial. Como mostrado na subseção 1.6.1, tomando o traço parcial do ambiente tem-se o estado do sistema S . Assim:

$$\rho_S(t) = \text{tr}_{amb} (U [\rho_S(0) \otimes \rho_A(0)] U^\dagger), \quad (4.3)$$

onde $\rho_S(t)$ é o estado do sistema S no instante t .

A Equação 4.3 já permite o estudo de S considerando que ele está em contato com o ambiente, porém nesta equação o operador U , responsável pela evolução temporal, age no espaço de Hilbert \mathbb{H}_{SA} do sistema $(S + A)$. Existe, no entanto, um formalismo que permite escrever a dinâmica para o sistema S usando operadores que agem somente no espaço de Hilbert \mathbb{H}_S , do próprio sistema de interesse. Este formalismo é conhecido como operador soma e é obtido a partir da relação na Equação 4.3.

A Equação 4.3 pode ser reescrita se a base e o estado inicial do ambiente forem conhecidos. Assumindo que a base do ambiente é dada por $\{|a_k\rangle\}$ e que no início da dinâmica o ambiente está no estado $|a_0\rangle$, a Equação 4.3 pode ser reescrita como:

$$\rho_S(t) = \sum_k \langle a_k | (U [\rho_S(0) \otimes |a_0\rangle \langle a_0|] U^\dagger) |a_k\rangle. \quad (4.4)$$

A Equação 4.4 pode ser reescrita como:

$$\rho_S(t) = \sum_k \langle a_k | U |a_0\rangle \rho_S(0) \langle a_0 | U^\dagger |a_k\rangle. \quad (4.5)$$

Da equação acima pode-se definir operadores M_k , tal como: $M_k \equiv \langle a_k | U |a_0\rangle$. Com esta definição a Equação 4.5 pode ser reescrita como:

$$\rho_S(t) = \sum_k M_k \rho_S(0) M_k^\dagger. \quad (4.6)$$

A Equação 4.6 descreve a dinâmica do sistema aberto S no formalismo dos operadores soma. Os operadores M_k , denominados operadores soma ou operadores de Kraus, agem somente no espaço de Hilbert \mathbb{H}_S do sistema de interesse e caracterizam a transformação do estado do sistema S .

4.2 Ruído Quântico

A forma dos operadores soma de um dado ruído pode ser obtida considerando um modelo para o ambiente e sua interação com o sistema de interesse. Nesta seção será apresentado um modelo que permite, além de obter os operadores soma M_k para diversos tipos de interação, observar o efeito da decoerência sobre um sistema. Novamente nesta seção as letras S e A serão usadas para distinguir o sistema de interesse do ambiente.

Considerando que o sistema de interesse no estudo seja dado por uma partícula sob influência de um potencial harmônico e que seu estado inicial é dado por um estado em superposição linear dos dois primeiros autoestados de energia, esta partícula pode ser vista como um qubit pois seu estado pode ser representado usando a base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. O Hamiltoniano que resulta na dinâmica temporal do sistema S é dado por:

$$\mathcal{H}_S = \omega_S a^\dagger a, \quad (4.7)$$

onde a é o operador de criação (que cria novos níveis de energia), a^\dagger o operador de aniquilação (que destrói níveis de energia) e ω_S é a frequência de oscilação. O ambiente que circunda o sistema de interesse será modelado como um banho de osciladores harmônicos quânticos. Tendo em vista que o Hamiltoniano de um único oscilador harmônico é dado por $\mathcal{H} = \omega b^\dagger b$, onde ω , b^\dagger e b são respectivamente a frequência de oscilação do oscilador e os operadores de criação e aniquilação, o Hamiltoniano que governa a dinâmica do ambiente é dado por uma soma destes osciladores:

$$\mathcal{H}_A = \sum_k^n \omega_k b_k^\dagger b_k, \quad (4.8)$$

onde ω_k é a frequência de oscilação do k -ésimo oscilador harmônico, b_k^\dagger é o operador de criação e b_k é o operador de aniquilação do k -ésimo oscilador. Os operadores b_k e b_k^\dagger satisfazem (PINTO, 2014):

$$b_k |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad e \quad b_k^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (4.9)$$

onde n representa um nível de energia discreto.

É suficiente, para esta definição, modelar o ambiente como um sistema de dois níveis e com temperatura zero. Assim, considera-se que o conjunto $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ é uma base do espaço de Hilbert do sistema A . Os vetores $|0\rangle$ e $|1\rangle$ são definidos como os dois estados de menor energia dos osciladores k . A representação dos operadores b_k e b_k^\dagger na base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ é obtida facilmente a partir das relações da Equação 4.9 conforme demonstrado abaixo para o operador b_k ,

$$b_k = \begin{bmatrix} \langle 0| b_k |0\rangle & \langle 0| b_k |1\rangle \\ \langle 1| b_k |0\rangle & \langle 1| b_k |1\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.10)$$

A representação do estado do sistema S também é dada pela matriz da Equação 4.10, pois $a = b_k$ e $a^\dagger = b_k^\dagger$. A partir do modelo apresentado para o ambiente e para o sistema

de interesse pode-se escrever o Hamiltoniano \mathcal{H}_{SA} , que resulta na dinâmica temporal para o sistema isolado $(S + A)$, dado por

$$\mathcal{H}_{SA} = (\mathcal{H}_S \otimes \mathbb{1}) + (\mathbb{1} \otimes \mathcal{H}_A) + \mathcal{H}_{\mathbb{1}},$$

onde $\mathbb{1}$ é uma matriz identidade de grau 2. Na equação acima $\mathcal{H}_{\mathbb{1}}$ é chamado Hamiltoniano de interação e é a parcela do operador \mathcal{H}_{SA} responsável pela interação entre os sistemas S e A . A forma do operador $\mathcal{H}_{\mathbb{1}}$ depende do tipo de interação entre o sistema e o ambiente.

A interação entre os sistemas S e A ocorre de forma muito rápida. Durante o período de tempo em que ocorre a interação as evoluções temporais individuais dos sistemas podem ser desconsideradas e, desta forma, durante este intervalo o Hamiltoniano do sistema é dado aproximadamente pelo Hamiltoniano de interação. Tendo por objetivo estudar exatamente a dinâmica no período em que ocorre a interação, essa aproximação deve ser levada em conta, assumindo uma dinâmica governada apenas pelo Hamiltoniano de interação, ou seja, $\mathcal{H}_{SA} = \mathcal{H}_{\mathbb{1}}$. De particular interesse para este trabalho será a definição dos operadores para o ruído conhecido como atenuação de amplitude.

4.3 Atenuação de Amplitude

A atenuação de amplitude é um ruído que pode ser obtido considerando uma interação dada por:

$$\mathcal{H}_{\mathbb{1}} = \sum_k g_k \left(a^\dagger b_k + a b_k^\dagger \right), \quad (4.11)$$

onde g_k é uma constante de acoplamento entre o sistema e o k -ésimo oscilador. Nesta seção será usado um método diferente para mostrar os efeitos da interação $\mathcal{H}_{\mathbb{1}}$ sobre o sistema S , calculando primeiro os operadores M_k e, a partir deles, descrevendo a mudança no estado de S devido à interação com o ambiente.

O efeito desta interação no sistema S pode ser observado considerando primeiramente o estado do sistema total $(S + A)$ para instantes $t > 0$, pois, se a matriz densidade $\rho_{SA}(t)$ for conhecida, pode-se obter, por meio do traço parcial, a matriz $\rho_S(t)$ que caracteriza somente o sistema S . Este será o método utilizado, assumindo que o sistema $(S + A)$ foi preparado de forma a possuir um estado inicial dado por:

$$|\psi(0)\rangle = [a|0_S\rangle + b|1_S\rangle] \otimes |0_A\rangle = a|00\rangle + b|10\rangle, \quad (4.12)$$

com $a^2 + b^2 = 1$, considerando, portanto, que o sistema parte de um estado puro e não emaranhado.

A evolução temporal do sistema é obtida usando a relação $|\psi(t)\rangle = U|\psi(0)\rangle$, onde o operador unitário de evolução é dado por $U = \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}_{\mathbb{1}}t}{\hbar}\right)$. Assim, o estado $|\psi(t)\rangle$ pode ser calculado como:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}_{\mathbb{1}}t}{\hbar}\right) |\psi(0)\rangle = a \cdot \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}_{\mathbb{1}}t}{\hbar}\right) |00\rangle + b \cdot \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}_{\mathbb{1}}t}{\hbar}\right) |10\rangle. \quad (4.13)$$

O desenvolvimento da equação acima é simplificado observando que o operador \mathcal{H}_1 comuta com o operador $(\mathcal{H}_S \otimes \mathbb{1})$, ou seja, $[\mathcal{H}_1, (\mathcal{H}_S \otimes \mathbb{1})] = 0$. Isto faz com que os autovetores de $(\mathcal{H}_S \otimes \mathbb{1})$ sejam também autovetores de \mathcal{H}_1 . Pode-se ainda notar que os autovetores de $(\mathcal{H}_S \otimes \mathbb{1})$ são dados pelo conjunto $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ que é a base usada como representação neste modelo (o que pode ser visto na Equação 4.13). Assim, a operação unitária obtida pelo Hamiltoniano \mathcal{H}_1 provoca apenas uma mudança na fase dos elementos da base, sendo a evolução da Equação 4.13 dada por:

$$|\psi(t)\rangle = a \cdot \exp\left(\frac{-i\lambda_0 t}{\hbar}\right) |00\rangle + b \cdot \exp\left(\frac{-i\lambda_1 t}{\hbar}\right) |10\rangle. \quad (4.14)$$

Na equação acima, λ_0 e λ_1 são os autovalores do Hamiltoniano de interação. Os valores de λ_0 e λ_1 podem ser obtidos diagonalizando a matriz \mathcal{H}_1 . Para este fim, primeiro é preciso encontrar os elementos do operador \mathcal{H}_1 na representação $(\mathcal{H}_S \otimes \mathbb{1})$. Isto é feito reescrevendo a Equação 4.11 usando as definições de a e de b_k (Equação 4.10) e notando que $a^\dagger = a^T$ e $b_k^\dagger = b_k^T$, conforme demonstrado abaixo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= \sum_k g_k \left(a^\dagger \otimes b_k + a \otimes b_k^\dagger \right), \\ \mathcal{H}_1 &= \sum_k g_k \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right), \\ \mathcal{H}_1 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

onde $\alpha \equiv \sum_k g_k$. O operador unitário que dá a evolução temporal é calculado com $U = \exp\left(\frac{-i\mathcal{H}_1 t}{\hbar}\right)$ ¹, resultando em:

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) & i \sin\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) & 0 \\ 0 & i \sin\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) & \cos\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Com isto, os operadores podem ser calculados notando que o estado inicial do ambiente é dado por $|0\rangle$ e que o conjunto $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ forma uma base do espaço de Hilbert do sistema A que representa o ambiente (PINTO, 2014). Assim:

$$M_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{bmatrix}, \quad (4.16)$$

$$M_1 = \begin{bmatrix} 0 & i \sin\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & i\sqrt{p} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.17)$$

¹ Escrevendo a função exponencial como série: $\exp(A) = \mathbb{1} + A + \frac{A^2}{2!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}$, onde $\mathbb{1}$ é uma matriz identidade e A uma matriz quadrada.

onde na segunda igualdade de M_0 e M_1 são usadas as relações $\sin^2\left(\frac{at}{\hbar}\right) = p$ e $\cos^2\left(\frac{at}{\hbar}\right) = (1 - p)$.

O resultado desta interação pode ser observado aplicando o formalismo dos operadores soma M_0 e M_1 acima. Considerando que o estado inicial do sistema é dado pela Equação 4.12, assim, a evolução do sistema é dada por $\rho_S(p) = \sum_k M_k \rho_S(0) M_k^\dagger$, onde ρ_S é a matriz densidade que representa o estado do sistema S . Desta forma, a matriz $\rho_S(t)$ é obtida com:

$$\begin{aligned} \rho_S(p) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^2 & ab \\ ab & b^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & i\sqrt{p} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^2 & ab \\ ab & b^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ i\sqrt{p} & 0 \end{bmatrix}, \\ \rho_S(p) &= \begin{bmatrix} a^2 + pb^2 & ab\sqrt{1-p} \\ ab\sqrt{1-p} & b^2(1-p) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

O parâmetro p é definido de forma que, para $p = 0$ o sistema não interagiu com o ambiente e para $p = 1$ tem-se a certeza que a interação ocorre. Da equação acima, para $p = 1$, o estado do sistema é dado por:

$$\rho_S(p = 1) = \begin{bmatrix} a^2 + b^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.19)$$

Esta interação resulta em um ruído conhecido como atenuação de amplitude (*amplitude damping*, em inglês). Este ruído simula interações com o ambiente externo que provocam perda de energia no sistema de interesse. Os operadores soma (Equação 4.16 e Equação 4.17) são usados, por exemplo, para descrever a emissão espontânea de um fóton em um átomo excitado. Neste caso, pode-se definir os vetores $|1\rangle$ e $|0\rangle$ respectivamente para os estados excitado e decaído do átomo e, assim, o sistema é dado por uma superposição destes estados: $a|0\rangle + b|1\rangle$. Após o decaimento, o estado do átomo é $|0\rangle$ e o sistema é representado por uma matriz densidade como a da Equação 4.19.

4.4 Atenuação de Fase

Um outro ruído pode ser obtido considerando uma interação dada por

$$\mathcal{H}_I = \sum_k^n g_k a^\dagger a (b_k + b_k^\dagger),$$

onde g_k é a constante de interação. A evolução da interação é calculada da mesma maneira que na seção anterior. Usando como base $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$, o Hamiltoniano

de interação é dado por

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_I &= (a^\dagger a) \otimes \sum_k (g_k b_k + g_k b_k^\dagger), \\ \mathcal{H}_I &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \left(\left(\sum_k g_k \right) \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \left(\sum_k g_k \right) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right), \\ \mathcal{H}_I &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & 0 & \alpha & 0 \end{bmatrix},\end{aligned}\tag{4.20}$$

onde $\alpha \equiv \sum_k g_k$. Usando esta equação, U pode ser escrito como:

$$U = \exp \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{i\alpha t}{\hbar} \\ 0 & 0 & -\frac{i\alpha t}{\hbar} & 0 \end{bmatrix}.$$

Escrevendo a exponencial como série (cf. Nota de rodapé 1), U é calculado como (PINTO, 2014);

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) & \cos\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) \\ 0 & 0 & i \sin\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) & i \sin\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) \end{bmatrix}.$$

Assim, os operadores soma são dados por $M_0 = \langle 0|U|0\rangle$ e $M_1 = \langle 1|U|1\rangle$ como:

$$M_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{bmatrix},\tag{4.21}$$

$$M_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & i \sin\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{p} \end{bmatrix},\tag{4.22}$$

onde $p = \sin^2\left(\frac{\alpha t}{\hbar}\right)$ é o parâmetro obtido normalizando o tempo de decoerência e pode ser entendido como a probabilidade de ocorrer um decaimento na fase. Como na seção anterior, $p = 0$ representa o sistema em seu estado inicial e $p = 1$ quando se tem a certeza da interação.

Da mesma forma que na seção anterior, a matriz densidade $\rho_S(p)$ (desenvolvendo $\rho = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ através da Equação 4.14) pode ser obtida por $\rho_S(p) = \sum_k M_k \rho_S(0) M_k^\dagger$ e $\rho_S(p)$ como:

$$\begin{aligned}\rho_S(p) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^2 & ab \\ ab & b^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^2 & ab \\ ab & b^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{p} \end{bmatrix}, \\ \rho_S(p) &= \begin{bmatrix} a^2 & ab\sqrt{1-p} \\ ab\sqrt{1-p} & b^2 \end{bmatrix}.\end{aligned}\tag{4.23}$$

Desta equação, com $p = 1$ o estado do sistema é dado por:

$$\rho_S(p = 1) = \begin{bmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & b^2 \end{bmatrix}, \quad (4.24)$$

o que equivale a uma distribuição de probabilidades de se obter $|0\rangle$ ou $|1\rangle$. Assim, a atenuação de fase elimina a coerência do sistema e torna o estado quântico clássico.

4.5 Otimização do Campo de Controle

O controle quântico geralmente busca um campo ótimo que leva um sistema de um estado inicial para um estado final que maximiza o valor esperado de um observável. Em um laboratório, o estado inicial e o observável frequentemente dependem de parâmetros experimentais continuamente ajustáveis. Naturalmente, o resultado da aplicação do controle ótimo produzirá um valor esperado final que depende desses parâmetros experimentais. O objetivo da aplicação de um controle ótimo é estabelecer condições para que um campo se mantenha ótimo, independente dos valores dos parâmetros, de modo que um campo ótimo determinado para um conjunto de valores forneça um resultado ótimo para quaisquer outros valores destes parâmetros. (LIMA; HO; RABITZ, 2014).

O algoritmo apresentado por Ho e Rabitz (2010) permite encontrar um campo de controle $E(t)$ que leva um sistema quântico de um estado inicial $|\psi(0)\rangle$ a um estado final $|\psi(T)\rangle$ em tempo T para obter o valor esperado $\langle O(T) \rangle \equiv \langle \psi(T) | O(T) | \psi(T) \rangle$ de um observável $O(T)$. A função de onda do estado $|\psi(t)\rangle$ evolui de acordo com a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \{ \mathcal{H}_0 - \mu E(t) \} |\psi(t)\rangle \quad (4.25)$$

e pode ser escrita como

$$|\psi(t)\rangle = U(t, 0) |\psi(0)\rangle, \quad (4.26)$$

onde

$$\frac{\partial}{\partial t} U(t, 0) = \frac{1}{i\hbar} \{ \mathcal{H}_0 - \mu E(t) \} U(t, 0), \quad U(0, 0) = \mathbb{1}. \quad (4.27)$$

O valor esperado $\langle O(t) \rangle$ é definido como

$$\langle O(t) \rangle = \langle \psi(t) | O(t) | \psi(t) \rangle. \quad (4.28)$$

Aqui, \mathcal{H}_0 é o Hamiltoniano livre do campo, μ o operador momento dipolo e $E^{(0)}(t)$ um campo de controle de referência que satisfaçam a equação

$$\frac{dO(t)}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} O(t) + \frac{1}{i\hbar} [O(t), \mathcal{H}_0 - \mu E^{(0)}(t)] = 0, \quad O(T) = O_T, \quad (4.29)$$

onde

$$[O(t), \mathcal{H}_0 - \mu E^{(0)}(t)] = O(t) \cdot (\mathcal{H}_0 - \mu E^{(0)}(t)) - (\mathcal{H}_0 - \mu E^{(0)}(t)) \cdot O(t)$$

é o comutador de $O(t)$ e $\mathcal{H}_0 - \mu E^{(0)}(t)$ e $O(T)$ é escolhido para coincidir com um observável específico O_T de interesse (LEWIS JR.; RIESENFELD, 1969 apud HO; RABITZ, 2010). Da Equação 4.29, $O(t)$ pode ser formalmente escrita como

$$O(t) = U_0(t, T) O_T U_0^\dagger(t, T), \quad (4.30)$$

onde o propagador $U_0(t, T)$ é governado pela equação de Schrödinger dependente do tempo propagada para trás

$$\frac{\partial}{\partial t} U_0(t, T) = \frac{1}{i\hbar} \{ \mathcal{H}_0 - \mu E^{(0)}(t) \} U_0(t, T), \quad U_0(t, t) = \mathbb{1}. \quad (4.31)$$

Da Equação 4.31 e do estado $|\psi^{(0)}(t)\rangle \equiv U_0(t, 0) |\psi(0)\rangle$, pode-se demonstrar que o valor esperado,

$$\begin{aligned} \langle \psi^{(0)}(t) | O(t) | \psi^{(0)}(t) \rangle &= \langle \psi^{(0)}(t) | U_0(t, T) O(T) U_0(T, t) | \psi^{(0)}(t) \rangle \\ &= \langle \psi^{(0)}(T) | O(T) | \psi^{(0)}(T) \rangle = \langle \psi(0) | O(0) | \psi(0) \rangle, \end{aligned} \quad (4.32)$$

é independente do tempo t , isto é, $\frac{d}{dt} \langle \psi^{(0)}(t) | O(t) | \psi^{(0)}(t) \rangle = 0$. Tomando a derivada em relação ao tempo da Equação 4.28 tem-se a equação de movimento de Heisenberg

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle O(t) \rangle &\equiv \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | O(t) | \psi(t) \rangle = \\ &\left\langle \psi(t) \left| -\frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}_0, O(t)] + \frac{\partial O(t)}{\partial t} \right| \psi(t) \right\rangle + \left\langle \psi(t) \left| \frac{1}{\hbar} [\mu, O(t)] \right| \psi(t) \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Aplicando a Equação 4.29, a Equação 4.33 pode ser escrita como

$$\frac{d}{dt} \langle O(t) \rangle = f_\mu(t) \{ E(t) - E^{(0)}(t) \}, \quad (4.34)$$

onde

$$f_\mu(t) \equiv \left\langle \psi(t) \left| \frac{1}{i\hbar} [\mu, O(t)] \right| \psi(t) \right\rangle = -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \{ \langle \psi(t) | O(t) \mu | \psi(t) \rangle \} \quad (4.35)$$

é uma funcional do campo de controle $E(t)$ e do campo de referência $E^{(0)}(t)$, sendo que Im denota a parte imaginária. Integrando a Equação 4.34, tem-se

$$\langle O(T) \rangle - \langle O(0) \rangle = \int_0^T f_\mu(t) \{ E(t) - E^{(0)}(t) \} dt, \quad (4.36)$$

onde $\langle O(T) \rangle$ é uma funcional do campo de controle $E(t)$ e $\langle O(0) \rangle$ é uma funcional de $E^{(0)}(t)$.

Das equações 4.34 e 4.36, um esquema de iteração monotonicamente convergente pode ser obtido escolhendo um campo de controle $E(t)$ de acordo com a relação (MIRRAHIMI; TURINICI; ROUCHON, 2005 apud HO; RABITZ, 2010)

$$E(t) = E^{(0)}(t) + \eta_0 S(t) f_\mu(t), \quad (4.37)$$

onde $\eta_0 > 0$ e $S(t)$ é uma função envelope não negativa para o campo de controle.

Este algoritmo pode ser adaptado para um estado misto trocando o vetor $\psi(t)$ por uma matriz densidade $\rho(t)$. Desta forma, encontra-se um campo $\varepsilon(t)$, $t \in [0, t_f]$ que leva o sistema de um estado inicial $\rho(0)$ para um estado final $\rho(t_f)$ em um tempo finito t_f tal que o valor esperado correspondente $\langle O(t_f) \rangle \equiv \text{tr} \{ \rho(t_f) O \}$ de um dado operador observável O é tão próximo quanto possível de seu valor máximo admissível. Considerando a equação da matriz densidade $\rho(t)$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}_0 - \mu \varepsilon(t), \rho(t)], \quad (4.38)$$

introduz-se um operador Hermitiano dependente do tempo $\mathcal{O}(t)$ que satisfaz a equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{O}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}_0 - \mu \varepsilon^{(0)}(t), \mathcal{O}(t)], \quad (4.39)$$

com a condição $\mathcal{O}(t_f) = O$, associado com um campo de controle de referência $\varepsilon^{(0)}(t)$. Da Equação 4.39, pode-se mostrar que o valor esperado $\text{tr} \{ \rho^{(0)}(t) \mathcal{O}(t) \}$ é independente do tempo t , onde a matriz densidade $\rho^{(0)}(t)$ também é associada com o campo de controle de referência $\varepsilon^{(0)}(t)$ e satisfaz a equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho^{(0)}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{H}_0 - \mu \varepsilon^{(0)}(t), \rho^{(0)}(t)], \quad \rho^{(0)}(0) = \rho(0). \quad (4.40)$$

Das equações 4.38 e 4.39, pode-se derivar a relação

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{O}(t) \rangle \equiv \frac{d}{dt} \text{tr} \{ \rho(t) \mathcal{O}(t) \} = f_\rho(t) \{ \varepsilon(t) - \varepsilon^{(0)}(t) \}, \quad (4.41)$$

onde

$$f_\rho(t) = -\frac{1}{i\hbar} \text{tr} \{ [\mathcal{O}(t), \mu] \rho(t) \}. \quad (4.42)$$

Integrando a Equação 4.41, tem-se

$$\langle \mathcal{O}(t_f) \rangle - \langle \mathcal{O}(0) \rangle = \int_0^{t_f} f_\rho(t) \{ \varepsilon(t) - \varepsilon^{(0)}(t) \} dt, \quad (4.43)$$

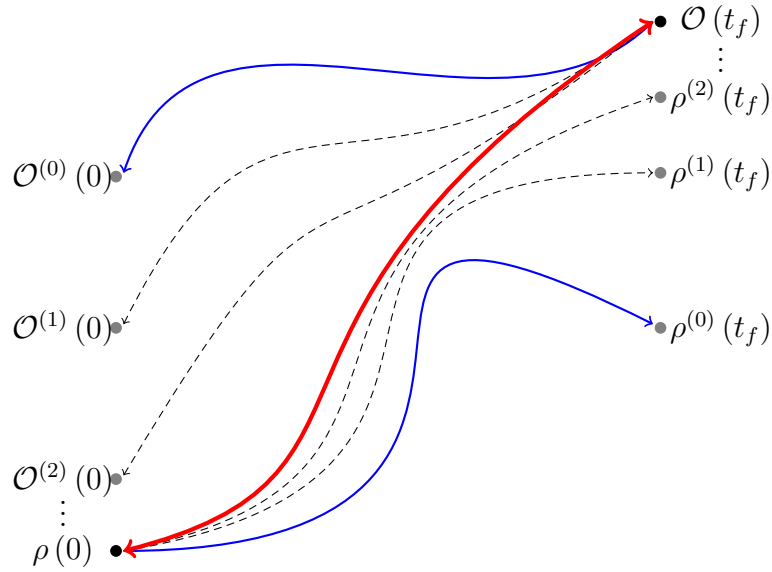
que é uma equação integral não linear para o campo de controle $\varepsilon(t)$. Das equações 4.41 e 4.43, um esquema de iteração monotonicamente convergente pode ser obtido escolhendo o campo de controle $\varepsilon(t)$ de acordo com a relação

$$\varepsilon(t) = \varepsilon^{(0)}(t) + \eta_0 S(t) f_\rho(t), \quad (4.44)$$

onde $\eta_0 > 0$ e $S(t)$ é uma função envelope não negativa para o campo de controle. Substituindo a Equação 4.44 na Equação 4.43 tem-se

$$\langle \mathcal{O}(t_f) \rangle - \langle \mathcal{O}(0) \rangle = \eta \int_0^{t_f} S(t) f_\rho^2(t) dt \geq 0, \quad (4.45)$$

Figura 7 – Ilustração do processo de ajuste iterativo do campo de controle.



Fonte: o autor.

isto é, $\langle \mathcal{O}(t_f) \rangle = \langle O(t_f T) \rangle = \text{tr} \{ \rho(t_f) O \} \geq \text{tr} \{ \rho^{(0)}(t_f) O \} = \langle \mathcal{O}(0) \rangle$. A Equação 4.44 forma uma relação de recorrência para a matriz densidade que pode ser aplicada iterativamente para refinar o campo de controle de modo que o valor esperado desejado $\langle O(t_f) \rangle$ aumente monotonicamente (LIMA; HO; RABITZ, 2014).

A Figura 7 ilustra este processo de otimização. Inicialmente, nas curvas representadas em azul, tem-se a aplicação do campo inicial na dinâmica do observável \mathcal{O} do tempo final t_f até o tempo 0 e na condição inicial ρ do tempo 0 até t_f . Então, com o resultado de f_μ , que depende da diferença entre as duas dinâmicas, é calculado um novo campo E . Com este novo campo, as dinâmicas de \mathcal{O} e ρ são calculadas novamente, representadas pelas curvas pontilhadas, assim como f_μ que resulta em um novo campo E . Este processo é repetido até que seja encontrado um campo que leve o resultado final da dinâmica do observável \mathcal{O} à condição inicial ρ e o da condição inicial ρ ao observável \mathcal{O} , representado pela curva em vermelho. Este resultado define um vínculo que restringe o comportamento do campo.

5 Markovianidade

Os sistemas quânticos abertos podem ser classificados em duas categorias, dependendo dos efeitos dos estados anteriores sobre os futuros. Tais efeitos são chamados *efeitos de memória* e sua existência em um determinado sistema é denominada *Markovianidade*.

5.1 Sistemas Markovianos

O estudo dos sistemas quânticos abertos atraiu muita atenção na literatura recente, principalmente devido ao interesse crescente nas aplicações práticas da teoria quântica, como a informação quântica e protocolos de comunicação, algoritmos quânticos e criptografia quântica (NIELSEN; CHUANG, 2010). Para que os potenciais dispositivos quânticos realizem tarefas de informação quântica em condições realistas, eles devem ser considerados sistemas quânticos abertos, isto é, deve-se atentar à sua interação com o ambiente. A teoria dos sistemas quânticos abertos provê as ferramentas necessárias para examinar as consequências desta interação entre um sistema principal de interesse e o ambiente a seu redor (BREUER; PETRUCCIONE, 2007). Em geral, tal interação não pode ser totalmente controlada e, portanto, não é desejada, já que ela tipicamente destrói as propriedades quânticas do sistema principal, devido aos efeitos da decoerência.

Do ponto de vista dos efeitos de memória, a evolução temporal dos sistemas quânticos abertos pode ser dividida em duas categorias: Markoviano e não-Markoviano. Enquanto a ausência da dependência do sistema quântico da evolução temporal anterior implica em um processo quântico sem memória e, portanto, Markoviano, as correlações não triviais entre diferentes estados do sistema através das dinâmicas fazem com que o processo quântico exiba efeitos de memória, sendo assim não-Markoviano. De fato, a presença de memória nas dinâmicas pode ajudar a proteger a coerência e as correlações quânticas nos sistemas abertos por longos intervalos de tempo. Várias técnicas diferentes foram propostas para medir a intensidade dos efeitos de memória (RIVAS; HUELGA; PLENIO, 2010; BREUER; LAINE; PILO, 2009; LUO; FU; SONG, 2012).

No caso de sistemas Markovianos, é possível proteger um sistema aberto a fim de evitar que ele perca sua coerência através do algoritmo de Ho e Rabitz (2010), que atua sobre uma equação mestra. Considerando a classe de ruído de atenuação de amplitude, descrita anteriormente pelos operadores de Kraus (Equação 4.16 e Equação 4.17), por exemplo, é possível representar seu efeito sobre um sistema aberto através de uma equação mestra na forma

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho] + \gamma [2\sigma_- \rho \sigma_+ - \sigma_+ \sigma_- \rho - \rho \sigma_+ \sigma_-], \quad (5.1)$$

onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano da dinâmica, ρ o operador densidade do estado inicial do sistema,

e a emissão espontânea é descrita pela taxa de emissão γ e pelo operador de Lindblad $\sqrt{\gamma}\sigma_-$, onde $\sigma_- \equiv |0\rangle\langle 1|$ e $\sigma_+ \equiv \sigma_-^\dagger$ (NIELSEN; CHUANG, 2010). A integração desta equação resulta na dinâmica de ρ sobre um tempo t . Para este trabalho, as integrais foram calculadas usando o método Adams-Bashforth-Moulton (descrito no Anexo A).

5.2 Sistemas Não-Markovianos

A distribuição e o fluxo de informação dentro de um sistema aberto e de seu reservatório através das dinâmicas representam um papel muito importante na criação de efeitos de memória não-Markovianos. Uma intuição natural é que se a informação flui do sistema aberto para o ambiente de forma monotônica durante a evolução temporal, a dinâmica resultante pode ser considerada Markoviana devido à ausência de efeitos de memória. Entretanto, se há um refluxo temporário de informação do ambiente para o sistema aberto, surgem efeitos de memória, já que os estados futuros do sistema aberto podem depender de estados passados. De fato, uma das primeiras medidas de não-Markovianidade propostas foi baseada na ideia de refluxo de informação (BREUER; LAINE; PILO, 2009).

Por outro lado, há duas outras caracterizações conhecidas de efeitos de memória não-Markovianos que são definidas pelas dinâmicas das correlações (especificamente, emaranhamento e informação mútua) em estados bipartidos compostos por um sistema aberto principal e um auxiliar adicional. Ambas as medidas foram recentemente relacionadas ao fluxo de informação, quantificado pela quantidade de entropia, entre o sistema e o ambiente. Concomitantemente, a avaliação analítica da maioria das medidas de não-Markovianidade é difícil por envolver processos de otimização necessários para se remover a dependência da medida das condições iniciais, sendo a não-Markovianidade uma propriedade dos processos quânticos e não de estados específicos.

5.2.1 Intensidade dos Efeitos de Memória

Nesta seção serão descritas as definições das medidas de não-Markovianidade baseadas em emaranhamento e em informação mútua, bem como discutido o problema de otimização da medida do emaranhamento para dinâmicas de um sistema de dois níveis. Inicialmente, será descrita a base para identificar os efeitos de memória não-Markovianos e quantificar sua intensidade usando as correlações. Supondo um processo quântico Λ , ou seja, um mapa completamente positivo que preserva o traço (CPTP), que representa a evolução dinâmica de um sistema S no estado ρ_S e um sistema auxiliar com evolução trivial A no estado ρ_A com a mesma dimensão de S , sendo o sistema composto do sistema aberto com o auxiliar no estado ρ_{SA} . Os mapas Markovianos sem memória satisfazem a relação de decomposição $\Lambda(t, 0) = \Lambda(t, s)\Lambda(s, 0)$, onde $\Lambda(t, s)$ é um mapa CPTP com $s \leq t$. Desta forma, o mapa dinâmico Λ é divisível, o que implica em uma evolução temporal sem memória no sistema quântico aberto.

Sabendo que ou a quantidade de emaranhamento E ou a informação mútua quântica I não podem aumentar sob mapas CPTP locais e que o mapa dinâmico Λ atua apenas sobre o subsistema S , a evolução sem memória implica que:

$$E((\Lambda(t, 0) \otimes \mathbb{1}) \rho_{SA}) \leq E((\Lambda(s, 0) \otimes \mathbb{1}) \rho_{SA}), \quad (5.2)$$

$$I((\Lambda(t, 0) \otimes \mathbb{1}) \rho_{SA}) \leq I((\Lambda(s, 0) \otimes \mathbb{1}) \rho_{SA}), \quad (5.3)$$

no tempo $0 \leq s \leq t$ para todos os estados quânticos compostos ρ_{SA} , e $\mathbb{1}$ sendo a operação identidade. Assim, é possível identificar a presença de efeitos de memória não-Markovianos pela violação de uma das desigualdades acima. Especificamente, qualquer aumento na medida do emaranhamento E ou da informação mútua quântica I durante a dinâmica sugere a existência de efeitos de memória. Adicionalmente, baseado na quantidade da violação dessas desigualdades, pode-se definir duas medidas distintas para a intensidade de memória como:

$$\mathcal{N}_E(\Lambda) = \max_{\rho_{SA}} \int_{(d/dt)E_{SA} > 0} \frac{d}{dt} E_{SA} dt, \quad (5.4)$$

$$\mathcal{N}_I(\Lambda) = \max_{\rho_{SA}} \int_{(d/dt)I_{SA} > 0} \frac{d}{dt} I_{SA} dt, \quad (5.5)$$

onde $E_{SA} = E((\Lambda \otimes \mathbb{1}) \rho_{SA})$ e $I_{SA} = I((\Lambda \otimes \mathbb{1}) \rho_{SA})$ e a maximização é dada sobre todos os estados iniciais puros do sistema bipartido ρ_{SA} . É importante enfatizar que, embora definidas de forma similar, as medidas baseadas em emaranhamento e informação mútua são distintas, sendo propostas como medidas individuais para a verificação de indivisibilidade e podem indicar a presença de memória independentemente uma da outra. Ainda deve-se notar que embora tenham sido originalmente apresentadas sem qualquer interpretação operacional em termos do fluxo de informação entre sistema e ambiente, foram recentemente utilizadas para estabelecer definições sobre teoria da informação e não-Markovianidade (FANCHINI et al., 2014; HASELI et al., 2014; KARPAT; PILO; MANISCALCO, 2015).

5.2.2 Otimização da Medida Baseada em Emaranhamento

Considerando que a avaliação de ambas medidas exige a solução de um problema de otimização não trivial, não é uma tarefa simples provar que elas não são equivalentes. Para demonstrar sua inequivalência de forma conclusiva, é necessário resolver o problema de otimização para pelo menos uma delas. Uma solução analítica para o problema da medida baseada no emaranhamento pode ser determinada a partir da Equação 5.4 (WOOTTERS, 1998), demonstrando que o máximo global para esta é sempre atingido pelo estado maximamente emaranhado (ou *estado de Bell* cf. seção 3.3) $|\phi^+\rangle$ para qualquer dinâmica de um qubit.

A concorrência é uma medida de variação do emaranhamento entre dois qubits. É calculada a como

$$C(\rho) \equiv \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\},$$

onde $\lambda_1, \dots, \lambda_4$ são os autovalores, em ordem decrescente, do operador Hermitiano

$$R = \sqrt{\sqrt{\rho}\tilde{\rho}\sqrt{\rho}}$$

com

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y),$$

onde σ_y é a matriz de Pauli Y (Equação 3.4) (WOOTTERS, 1998).

Dado um estado bipartido inicial puro ρ_{SA} e um mapa dinâmico arbitrário Λ local, a evolução do emaranhamento medida pela concorrência pode ser descrita pela equação (KONRAD et al., 2008 apud JIMÉNEZ FARIÁS et al., 2009)

$$C[(\Lambda \otimes \mathbb{1}) \rho_{SA}] = C[(\Lambda \otimes \mathbb{1}) |\phi^+\rangle \langle \phi^+|] C(\rho_{SA}), \quad (5.6)$$

onde $|\phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$ e $C(\rho_{SA})$ é a concorrência do estado inicial. $C[(\Lambda \otimes \mathbb{1}) \rho_{SA}]$ e $C[(\Lambda \otimes \mathbb{1}) |\phi^+\rangle \langle \phi^+|]$ são, respectivamente, a concorrência do estado inicial puro ρ_{SA} e do estado de Bell $|\phi^+\rangle \langle \phi^+|$ conforme o ambiente interage com o sistema aberto S . Assim, a concorrência de todos os estados puros evolui como o estado maximamente emaranhado, com a diferença de o emaranhamento destas ser reescalado pela quantidade de emaranhamento no estado inicial. Derivando ambos os lados da equação acima pelo tempo, tem-se:

$$\frac{d}{dt} C[(\Lambda \otimes \mathbb{1}) \rho_{SA}] = C(\rho_{SA}) \cdot \frac{d}{dt} C[(\Lambda \otimes \mathbb{1}) |\phi^+\rangle \langle \phi^+|]. \quad (5.7)$$

Como fica claro, uma relação similar ocorre com a taxa de variação da concorrência, ou seja, a taxa de variação da evolução da concorrência de qualquer estado inicial puro é exatamente a mesma do estado maximamente emaranhado, reescalada pela quantidade de emaranhamento no estado inicial. Assim, esta relação prova que a maior recuperação de concorrência através da dinâmica do sistema aberto é sempre atingida pelo estado inicial maximamente emaranhado.

Parte III

Resultados

6 Inequivalência das Medidas de não-Markovianidade

Apresentados os quantificadores dos efeitos de memória não-Markovianos baseados em correlação, é possível mostrar um modelo de sistema quântico aberto no qual a inequivalência das medidas de não-Markovianidade pode ser claramente demonstrada. Deve-se notar que a solução da otimização na Equação 5.5 não é geral e, de fato, o estado inicial ótimo depende do modelo utilizado. Entretanto, tendo resolvido o problema de otimização para a medida baseada em emaranhamento, é suficiente encontrar um sistema quântico aberto para o qual o processo quântico seja Markoviano de acordo com a medida baseada em emaranhamento enquanto é não-Markoviano para a medida baseada em informação mútua. Mais especificamente, será considerado um modelo de atenuação de amplitude generalizada que induz ressurgimentos temporários na informação mútua, mas não no emaranhamento através da evolução temporal do sistema quântico aberto.

Para se poder avaliar as medidas de não-Markovianidade \mathcal{N}_E e \mathcal{N}_I , é preciso calcular a evolução temporal do sistema composto do sistema aberto e do auxiliar, tendo este uma evolução temporal trivial. Em particular, a dinâmica do sistema composto ρ_{SA} sob o modelo da atenuação de amplitude generalizada pode ser expressa com a representação do operador soma da seguinte forma:

$$\rho_{SA}(t) = \sum_i K_i(t) \rho_{SA}(0) K_i^\dagger(t), \quad (6.1)$$

onde S e A representam, respectivamente, o sistema de interesse e um sistema auxiliar em contato com o ambiente (representado por E , neste caso) e os operadores de Kraus que descrevem a dinâmica são:

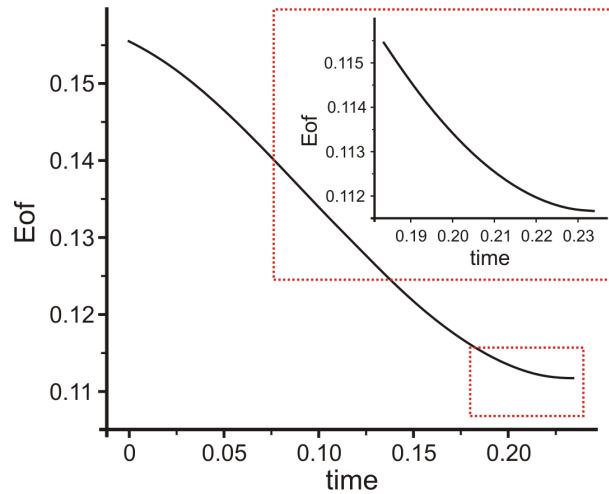
$$\begin{aligned} K_1(t) &= \sqrt{s(t')} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{r(t')} \end{pmatrix} \otimes \mathbb{1}, \\ K_2(t) &= \sqrt{s(t')} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1-r(t')} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{1}, \\ K_3(t) &= \sqrt{1-s(t')} \begin{pmatrix} \sqrt{r(t')} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{1}, \\ K_4(t) &= \sqrt{1-s(t')} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{1-r(t')} & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{1}, \end{aligned} \quad (6.2)$$

com $s(t') = \cos^2 \omega t'$ e $r(t') = e^{-t'}$. Sendo $t' \equiv t - H_s(t - t_c)(t - t_c)$, onde $H_s(x)$ é a função de passo Heaviside definida como $H_s(x) = \frac{d}{dx} \max\{x, 0\}$, e t_c é o tempo crítico após o qual a decoerência cessa e a dinâmica se torna trivial. Assim, considera-se o

caso em que o sistema quântico aberto fica protegido dos efeitos do ambiente quando um tempo t_c é atingido. O modelo é construído desta forma por simplicidade, uma vez que a dinâmica completa da decoerência não é necessária para provar a inequivalência.

A Figura 8 mostra a evolução temporal da medida baseada no emaranhamento \mathcal{N}_E e a Figura 9 a medida baseada na informação mútua \mathcal{N}_I para o canal de atenuação de amplitude generalizada com tempo crítico $t_c = 0.25$ e $\omega = 5$. Enquanto o estado inicial do sistema e do auxiliar ρ_{SA} é escolhido como o estado de Bell $|\phi^+\rangle$ para a medida baseada no emaranhamento, no caso da medida baseada na informação mútua, é escolhido $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ onde $|\psi\rangle = a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle$ com $a = 0.05$, $b = 0.95$, $c = 0.17$ e $d = \sqrt{1 - a^2 - b^2 - c^2}$ sendo os coeficientes que maximizam a variação positiva da informação mútua. Tendo provado que $|\phi^+\rangle$ é o estado ótimo para a medida baseada no emaranhamento, conclui-se que o processo quântico é definitivamente Markoviano em relação a ela, já que não há ressurgimento na dinâmica do emaranhamento. Entretanto, observa-se que a dinâmica da informação mútua exibe um ressurgimento enquanto o emaranhamento permanece monotonicamente decrescente, o que pode ser visto no detalhe da Figura 9. Assim, o exemplo encontrado mostra que as medidas \mathcal{N}_E e \mathcal{N}_I são inequivalentes em geral.

Figura 8 – Evolução Temporal do emaranhamento de formação para o modelo de atenuação de amplitude considerado com $t_c = 0.25$. O detalhe mostra a região de interesse. O estado inicial para o sistema e para o auxiliar é $|\phi^+\rangle$.

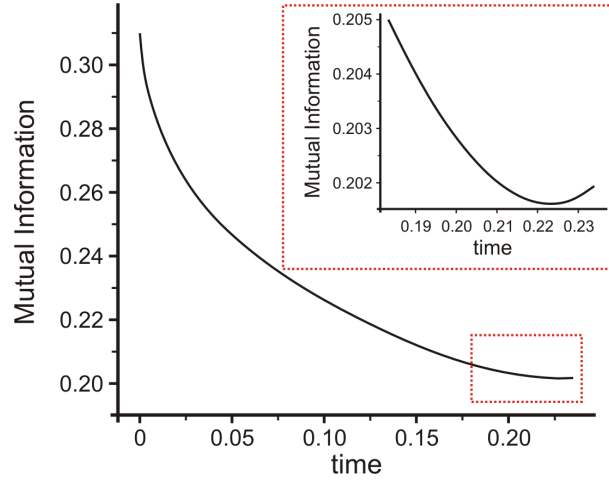


Fonte: Cervati Neto, Karpat e Fanchini (2016).

6.1 Fluxo de Informação Acessível e Inacessível

Esta inequivalência pode ser explicada através de conceitos da teoria da informação para se compreender a diferença entre as duas medidas. A informação acessível, também conhecida como correlação clássica, quantifica o máximo de informação clássica de um

Figura 9 – Evolução Temporal da informação mútua para o modelo de atenuação de amplitude considerado com $t_c = 0.25$. O detalhe mostra a região de interesse. O estado inicial para o sistema e para o auxiliar é $|\phi^+\rangle$.



Fonte: Cervati Neto, Karpát e Fanchini (2016).

subsistema que pode ser obtida realizando observações locais sobre outro (Equação 2.33). Por outro lado, a informação inacessível quantifica o mínimo de informação quântica de um sistema que não pode ser obtida observando localmente o outro, o que é a chamada discórdia quântica (Equação 2.34, com $S(A : B) \equiv I_{AE}$).

As medidas de não-Markovianidade baseadas em emaranhamento e informação mútua são respectivamente relacionadas com o fluxo de informação acessível e total no sistema composto do sistema aberto, auxiliar e ambiente. Assumindo que o estado tripartido do sistema total SAE é inicialmente puro, pode ser mostrado que o comportamento monotonicamente decrescente do sistema bipartido SA é diretamente ligado ao comportamento monotonicamente crescente da informação acessível do sistema bipartido como (FANCHINI et al., 2014)

$$\frac{dE_{SA}}{dt} = -\frac{dJ_{AE}}{dt}. \quad (6.3)$$

Ou seja, se a quantidade de informação acessível que o ambiente E pode obter sobre o auxiliar A , por meio da interação com S , diminui temporariamente durante a dinâmica, então surge um efeito de memória e o processo se torna não-Markoviano com base na Equação 5.4. De fato, há uma relação similar entre a taxa de variação da informação mútua nos sistemas bipartidos SA e AE ,

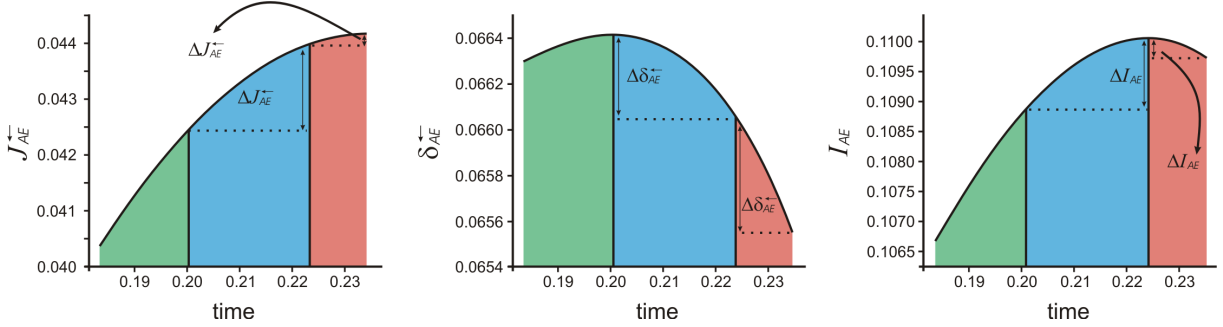
$$\frac{dI_{SA}}{dt} = -\frac{dI_{AE}}{dt} = -\left(\frac{dJ_{AE}}{dt} + \frac{d\delta_{AE}}{dt}\right), \quad (6.4)$$

que relaciona o surgimento de efeitos de memória não-Markovianos, em relação à Equação 5.5 à diminuição temporária das correlações totais (acessível e inacessível) no estado bipartido AE através da dinâmica do sistema aberto. Assim, comparando Equação 6.3 e Equação 6.4, fica claro que a equivalência ou inequivalência das duas medidas de não-

Markovianidade baseadas em correlações é determinada pela taxa de variação da informação inacessível δ_{AE}^{\leftarrow} .

É importante ressaltar que a discussão sobre a distribuição de correlações no sistema total SAE ocorre considerando um sistema de temperatura zero, isto é, um caso em que se tem um estado inicial puro para o ambiente E . No entanto, mesmo tendo um modelo de sistema aberto em que o ambiente começa em um estado misto (ambiente de temperatura finita), este pode ser purificado sem perda de generalidade e, portanto, as mesmas conclusões baseadas na Equação 6.3 e Equação 6.4 ainda podem ser obtidas substituindo E por EE' , onde E' é um sistema adicional de purificação do ambiente.

Figura 10 – Dinâmicas da informação acessível J_{AE}^{\leftarrow} , da informação inacessível δ_{AE}^{\leftarrow} e da informação mútua quântica I_{AE} (soma da informação acessível e inacessível) no intervalo de tempo de interesse deste estudo para a atenuação de amplitude generalizada.



Fonte: Cervati Neto, Karpát e Fanchini (2016).

Para se compreender a relação entre as duas medidas foi criada a Figura 10, que mostra a evolução temporal da informação acessível J_{AE}^{\leftarrow} , da informação inacessível δ_{AE}^{\leftarrow} e da informação mútua quântica I_{AE} para o modelo de atenuação de amplitude considerado. É mostrado apenas o comportamento dinâmico destas três medidas para o intervalo específico onde a inequivalência das medidas baseadas em correlações se torna evidente. Para melhor compreensão as dinâmicas são divididas em três regiões, claramente visíveis na Figura 10. Na primeira região, todas as grandezas consideradas crescem monotonamente, o que implica um processo Markoviano, de acordo com ambas as medidas. Na segunda região, J_{AE}^{\leftarrow} continua crescendo monotonamente indicando comportamento Markoviano segundo a medida baseada no emaranhamento. Pode-se notar que ainda que a taxa de variação da informação inacessível δ_{AE}^{\leftarrow} seja negativa nesta região, a informação mútua I_{AE} mantém sua tendência crescente, pois a magnitude da taxa de variação da informação acessível é maior que a da informação inacessível, ou seja, $\left| \frac{dJ_{AE}^{\leftarrow}}{dt} \right| > \left| \frac{d\delta_{AE}^{\leftarrow}}{dt} \right|$. Finalmente, na terceira região, ambas informações, acessível J_{AE}^{\leftarrow} e inacessível δ_{AE}^{\leftarrow} , se comportam como na segunda região, isto é, J_{AE}^{\leftarrow} cresce e δ_{AE}^{\leftarrow} decresce monotonamente. Porém, há uma diferença crucial aqui, que é o fato de a magnitude da taxa de variação da informação

inacessível ser maior que a da informação acessível, ou seja, $\left| \frac{d\delta_{AE}}{dt} \right| > \left| \frac{dJ_{AE}}{dt} \right|$.

Como consequência, a informação mútua I_{AE} começa a decrescer implicando uma dinâmica não-Markoviana, enquanto a dinâmica ainda é completamente Markoviana com base no comportamento do emaranhamento de formação. De fato, este resultado demonstra que a inequivalência das medidas baseadas em emaranhamento e em informação mútua é estritamente relacionada ao equilíbrio entre decaimento e crescimento das partes acessível e inacessível da informação, ou seja, se o ambiente perde correlações quânticas mais rápido que ganha correlações clássicas, as medidas de não-Markovianidade baseadas em correlações são inequivalentes.

Vale enfatizar que os resultados aqui obtidos foram publicados na *Physical Review A*, 94 (2016), sendo estes de grande importância para a compreensão e distinção das medidas de não-Markovianidade.

7 Teoria de Controle em Sistemas Markovianos

A construção de um computador quântico não é possível atualmente devido ao fato de não haver condições que mantenham as propriedades quânticas de um estado. Alguns métodos foram propostos para proteger um estado quântico da interação destrutiva com o ambiente. Uma das formas de realizar esta proteção é aplicando um método numérico para determinar um campo ótimo que leve um sistema de um estado inicial para um final que maximize o valor esperado de um observável (LIMA; HO; RABITZ, 2014). No caso, um método que ajusta um campo inicial arbitrário até que este efetue a operação esperada para qualquer estado inicial.

A partir da Equação 5.1 e utilizando o método descrito na seção 4.5, pode-se obter alguns resultados relevantes. De forma similar, é possível representar a atenuação de fase por uma equação mestra na forma

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho] + \frac{\gamma}{2} [\sigma_z \rho \sigma_z - \rho], \quad (7.1)$$

onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano da dinâmica, ρ é o operador densidade do estado inicial do sistema, γ é a constante de acoplamento e σ_z é a matriz de Pauli Z (Equação 3.5).

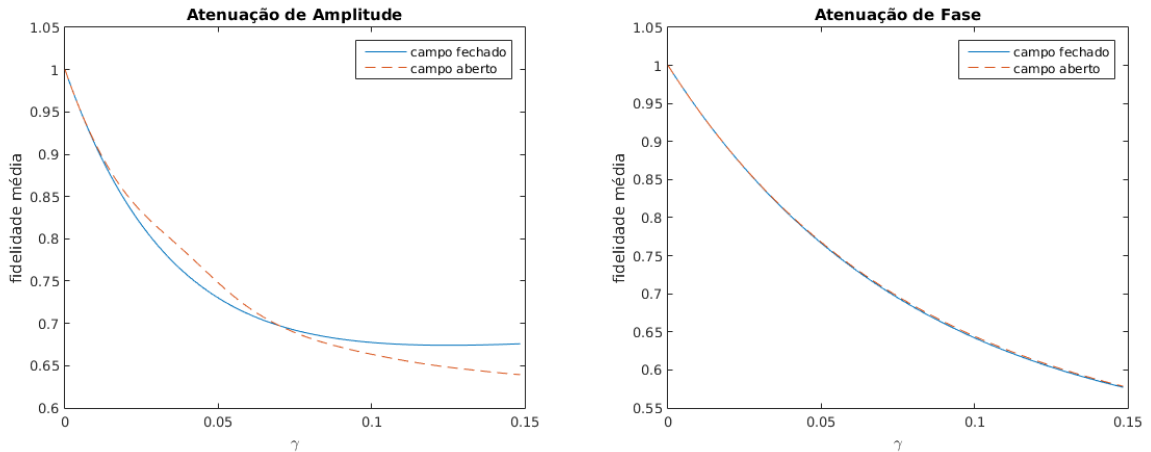
Considerando um tempo final $t_f = 19$, constante de acoplamento $\gamma = 0$ (sistema fechado), $\eta = 0.01$, uma função envelope $S = \sin^2\left(\frac{t}{t_f}\right)$ e um campo inicial de referência $E_0 = \sin(2t)$ é possível encontrar um campo E que faça a operação de Hadamard em um qubit para qualquer condição inicial. Para isso, é preciso determinar um ou mais vínculos, estados linearmente independentes nos quais o resultado da operação é conhecido, e usá-los para calcular a dinâmica do fim ao início através do método e ajustar o campo de acordo com os resultados. Partindo deste campo, é feito o cálculo da dinâmica do início da operação ao fim, ajustando novamente o campo. Este processo é repetido várias vezes para todos os vínculos dados e como, pelo método, converge em um resultado, depois de um número de execuções o ajuste do campo diminui até se tornar desprezível. Assim, tem-se um campo que realiza a operação para todos os vínculos e, dado um número suficiente de vínculos, para qualquer que seja o estado inicial. Deste modo, aplicando este campo sobre um estado inicial obtém-se o resultado da operação Hadamard sobre ele.

O teste da otimização do campo consiste em utilizar este campo ótimo encontrado para diferentes valores de γ , ou seja, para sistemas abertos com diferentes intensidades de interferência. Foram testados dois tipos de interação entre sistema e ambiente: Atenuação de Amplitude (seção 4.3) e Atenuação de Fase (seção 4.4). Para cada uma foi feito o cálculo da dinâmica para vários valores de γ com E sendo calculado para um sistema

fechado ($\gamma = 0$) ou aberto ($\gamma > 0$) e comparados os valores da fidelidade¹ dos estados finais obtidos em relação aos esperados.

Inicialmente, foram comparados os resultados obtidos ao se utilizar 3 vínculos ($|0\rangle \rightarrow \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$, $|1\rangle \rightarrow \frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}$ e $\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow |0\rangle$), sendo estes os resultados esperados segundo a tabela verdade da porta de Hadamard) e as condições iniciais $0 \leq \alpha \leq 1$ e $0 \leq \beta \leq 1$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, tais que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. A variação da fidelidade média para ambos os casos é ilustrada na Figura 11. É possível notar que no caso da atenuação de amplitude (Figura 11a), há um ponto de inflexão antes do qual o campo otimizado no sistema aberto apresenta resultado melhor que o campo otimizado no sistema fechado, mas depois deste, a otimização não é capaz de controlar o efeito da interferência do ambiente. No caso da atenuação de fase (Figura 11b), ambos os campos, embora sejam diferentes, têm a mesma fidelidade média para cada valor de γ , tornando a otimização ineficaz.

Figura 11 – Gráficos da variação da fidelidade média em função de γ com 3 vínculos e condições iniciais reais para (a) atenuação de amplitude e (b) atenuação de fase.

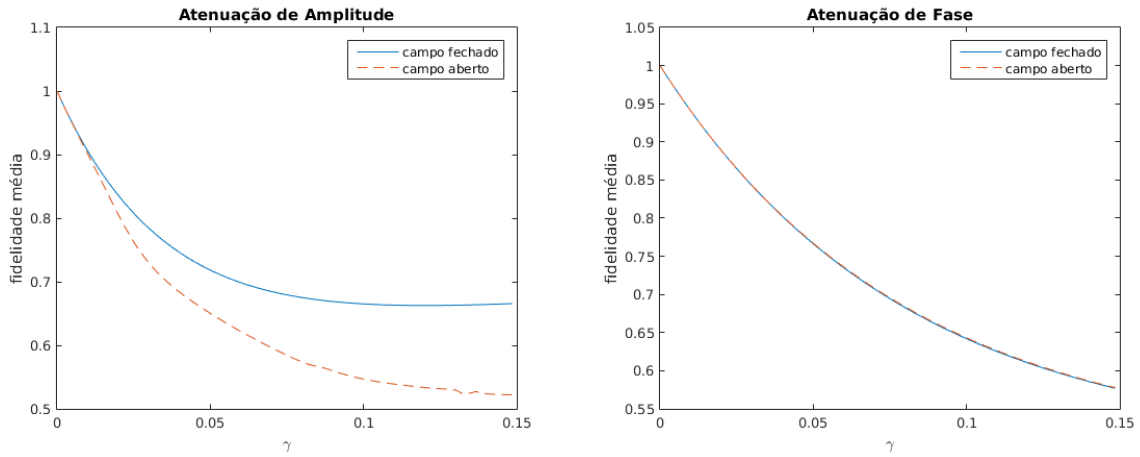


Fonte: o autor.

Foi feito então outro teste, aumentando o número de vínculos para 6 (adicionando $\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow |1\rangle$, $\frac{|0\rangle+i|1\rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow \frac{|0\rangle+|1\rangle+i(|0\rangle-|1\rangle)}{2}$ e $\frac{|0\rangle-i|1\rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow \frac{|0\rangle+|1\rangle-i(|0\rangle-|1\rangle)}{2}$) e mantendo $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Os resultados são apresentados na Figura 12. No caso da atenuação de amplitude (Figura 12a), a fidelidade média obtida com o campo calculado com o sistema fechado foi muito maior que a do campo calculado no sistema aberto. Novamente, para a atenuação de fase (Figura 12b), não há diferença perceptível. Deste modo, a adição de mais vínculos não levou a um resultado melhor. De fato, os vínculos adicionais criaram restrições desnecessárias à forma do campo, já que os 3 iniciais eram linearmente independentes e, portanto, suficientes. Assim, foi decidido usar apenas 3 vínculos para o caso geral, descrito a seguir.

¹ A fidelidade é uma medida de distância entre estados quânticos e é calculada por $F(\rho, \varphi) = \text{tr}(\rho \cdot \varphi)$. Quanto maior a fidelidade menor a distinguibilidade dos estados (NIELSEN; CHUANG, 2010).

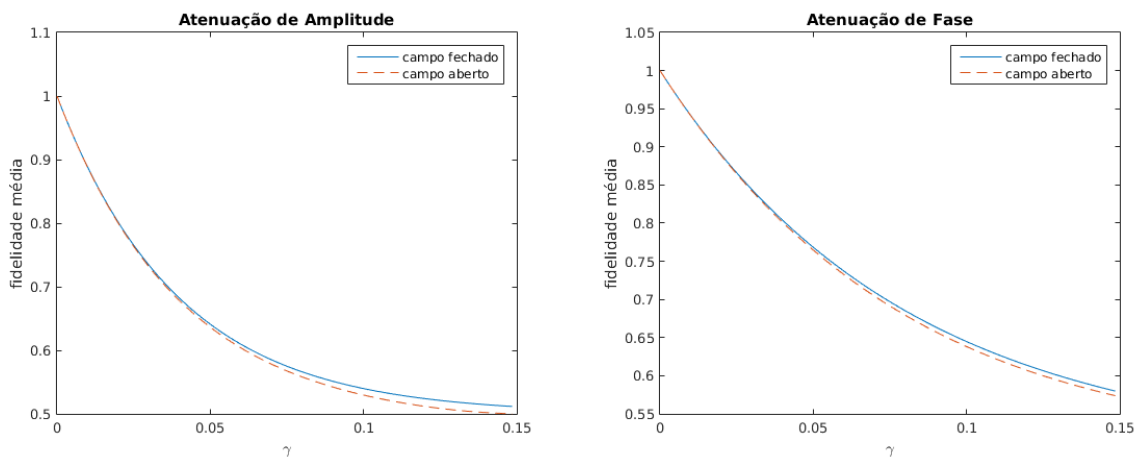
Figura 12 – Gráficos da variação da fidelidade média em função de γ com 6 vínculos e condições iniciais reais para (a) atenuação de amplitude e (b) atenuação de fase.



Fonte: o autor.

Considerando a representação dos estados puros possíveis pelo vetor de Bloch (Equação 1.4), com $0 \leq \theta \leq 2\pi$ e $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, as condições iniciais são definidas variando os valores de θ e φ (sendo usados 100 valores equidistantes entre 0 e 2π para cada), e é calculado o valor da média das fidelidades dos resultados obtidos com a interferência do ruído em relação aos ideais. A Figura 13 mostra o valor da fidelidade média de todas as condições iniciais em função da constante de acoplamento γ .

Figura 13 – Gráficos da variação da fidelidade média em função de γ com condições iniciais complexas para (a) atenuação de amplitude e (b) atenuação de fase.



Fonte: o autor.

Para o caso da atenuação de amplitude (Figura 13a), é possível perceber uma pequena diferença entre os valores médios da fidelidade quando se aplica o campo calculado em um sistema fechado e do calculado em um sistema aberto (ambos sendo aplicados, no

entanto, em uma dinâmica de um sistema aberto, com $0 \leq \gamma \leq 0.15$). Para todas as condições iniciais a fidelidade² com $\gamma = 0$ é 1, o que garante que os campos encontrados realizam efetivamente a operação de Hadamard para qualquer condição inicial no tempo dado. Já para a atenuação de fase (Figura 13b), a fidelidade média da dinâmica para o campo calculado no sistema fechado e para o calculado no sistema aberto apresentam uma diferença pouco menor que a encontrada para a atenuação de amplitude. Para ambos os casos, a diferença entre os valores obtidos é quase imperceptível, independente de a otimização relevar o ruído ou não. Portanto, esta variação do método não é adequada para realizar o controle ótimo no caso geral, em que a condição inicial não é conhecida.

² A fidelidade é obtida comparando o valor final da dinâmica calculada aplicando o campo na equação mestra com o resultado analítico da operação unitária (cf. Equação 1.10), isto é, $\rho = \mathcal{H}\rho_0\mathcal{H}^\dagger$, onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano (no caso, a matriz de Hadamard) e ρ é o resultado desta operação sobre o estado inicial ρ_0 .

8 Perspectivas

As comparações feitas para a otimização do campo através de métodos numéricos foram realizadas apenas para a porta lógica Hadamard atuando sobre um único qubit. Outras operações mais complexas ou com sistemas maiores deverão ser testadas a seguir. Também é interessante verificar a efetividade da proteção em relação a diferentes classes de ruído. Alguns estudos nesta direção já estão em andamento.

Tendo uma solução analítica para a minimização do emaranhamento (como descrito na subseção 5.2.2), foi possível fazer a comparação entre as medidas de não-Markovianidade conhecidas. A partir disso, deve ser procurado um campo de controle ótimo que maximize a não-Markovianidade de uma dinâmica. A próxima etapa do trabalho será encontrar este campo para os parâmetros da dinâmica descritos pelo artigo de Cui, Xi e Pan (2008) de modo a otimizar o controle da decoerência.

Conclusões

Foram apresentadas provas conclusivas de que as medidas quânticas baseadas em correlação para não-Markovianidade são, em geral, inequivalentes. No caso de um único qubit, foi demonstrado que o estado bipartido ótimo inicial do sistema aberto e do auxiliar para a medida baseada em emaranhamento é dado por um dos estados de Bell maximamente emaranhados, independente do modelo para a dinâmica do sistema aberto. Com base nesta descoberta, foi provada a inequivalência das medidas baseadas em emaranhamento e em informação mútua através de um exemplo explícito de uma dinâmica que descreve um tipo de processo de atenuação de amplitude para um sistema de dois níveis. Adicionalmente, foi dada uma explicação usando teoria da informação para quando diferentes conclusões podem ser tiradas das duas medidas consideradas. Este tratamento revelou que quando o ambiente perde correlações quânticas para o auxiliar mais rápido que ganha correlações clássicas dele, as duas medidas de não-Markovianidade baseadas em correlações se tornam inequivalentes.

Os resultados da otimização do controle ótimo demonstram que, para um ruído mais intenso, o método numérico utilizado não tem vantagens significativas sobre o campo calculado em um sistema fechado. De fato, a tentativa de corrigir o campo quando a interação com o ambiente é maior tem um efeito que distancia mais o estado final do ideal que o encontrado caso esta interferência fosse ignorada.

Bibliografia

- BOHR, Niels. On the Constitution of Atoms and Molecules, Part II. **Philosophical Magazine**, v. 26, p. 153476–153502, 1913.
- BREUER, Heinz-Peter; LAINE, Elsi-Mari; PIILO, Jyrki. Measure for the Degree of non-Markovian Behavior of Quantum Processes in Open Systems. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 103, p. 210401–210405, 2009.
- BREUER, Heinz-Peter; PETRUCCIONE, Francesco. **The Theory of Open Quantum Systems**. Oxford: Oxford Press, 2007. 612 p.
- CERVATI NETO, Alaor; KARPAT, Göktuğ; FANCHINI, Felipe Fernandes. Inequivalence of correlation-based measures of non-Markovianity. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 94, p. 032105–032110, 2016.
- COHEN-TANNOUJDI, Claude; DIU, Bernard; LALOË, Frank. **Quantum Mechanics**. Tradução: Susan Reid Hemley, Nicole Ostrowsky e Dan Ostrowsky. Paris: Wiley-Interscience, 1977. v. 1. 889 p.
- COVER, Thomas M.; THOMAS, Joy A. **Elements of Information Theory**. 2. ed. Hoboken: Wiley-Interscience, 2006. 748 p.
- CUI, Wei; XI, Zai Rong; PAN, Yu. Optimal Decoherence Control in non-Markovian open dissipative quantum systems. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 77, p. 032117–032127, 2008.
- FANCHINI, Felipe Fernandes et al. Non-Markovianity through Accessible Information. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 112, p. 210402–210406, 2014.
- GROVER, Lov Kumar. A fast quantum mechanical algorithm for database search. In: ANNUAL ACM SYMPOSIUM ON THE THEORY OF COMPUTING, 28., 1996, Philadelphia. **Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing**. New York: Association for Computing Machinery, 1996.
- HASELI, S. et al. Non-Markovianity through flow of information between a system and an environment. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 90, p. 052118–052127, 2014.
- HENDERSON, L.; VEDRAL, V. Classical, quantum and total correlations. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 34, p. 356899–356906, 2001.
- HO, Tak-San; RABITZ, Herschel. Accelerated monotonic convergence of optimal control over quantum dynamics. **Physical Review E**, American Physical Society, v. 83, p. 026703–026717, 2010.

- HUFFMAN, David Albert. A Method for the Construction of Minimum-Redundancy Codes. **Proceedings of the IRE**, Institute of Electrical e Electronics Engineers, v. 40, n. 9, p. 1098–1101, 1952.
- JIMÉNEZ FARÍAS, O. et al. Determining the Dynamics of Entanglement. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 324, p. 1414–1417, 2009.
- KARPAT, Göktuğ; PILO, Jyrki; MANISCALCO, Sabrina. Controlling entropic uncertainty bound through memory effects. **Europhysics Letters**, IOP Science, v. 111, p. 50006, 2015.
- KONRAD, Thomas et al. Evolution equation for quantum entanglement. **Nature Physics**, Springer Nature, v. 4, p. 99–102, 2008.
- LEWIS JR., H. R.; RIESENFELD, W. B. An Exact Quantum Theory of the Time-Dependent Harmonic Oscillator and of a Charged Particle in a Time-Dependent Electromagnetic Field. **Journal of Mathematical Physics**, v. 10, p. 1458–1473, 1969.
- LIMA, Emanuel F. de; HO, Tak-San; RABITZ, Herschel. Invariance of quantum optimal control fields to experimental parameters. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 89, p. 043421–043428, 2014.
- LUO, Shunlong; FU, Shuangshuang; SONG, Hongting. Quantifying non-Markovianity via correlations. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 86, p. 044101–044104, 2012.
- MIRANDA, Cristiano Campos de. **Violação da Superaditividade Forte do Emaranhamento Quântico**. 2015. 98 p. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal do Mato Grosso, Cuiabá.
- MIRRAHIMI, Mazyar; TURINICI, Gabriel; ROUCHON, Pierre. Reference Trajectory Tracking for Locally Designed Coherent Quantum Controls. **The Journal of Physical Chemistry A**, American Chemical Society Publications, v. 109, p. 112631–112637, 2005.
- MODULE for Adams-Bashforth-Moulton Method for O.D.E.'s. 2003. Disponível em: <<http://mathfaculty.fullerton.edu/mathews/n2003/AdamsBashforthMod.html>>. Acesso em: 27 jan. 2017.
- MOORE, Gordon Earle. Cramming more components onto integrated circuits. **Electronics**, McGraw-Hill, v. 38, 1965.
- NIELSEN, Michael A.; CHUANG, Isaac L. **Quantum Computation and Quantum Information**. 10th Anniversary Edition. New York: Cambridge University Press, 2010. 676 p.
- OLLIVIER, Harold; ZUREK, Wojciech H. Quantum Discord: A Measure of the Quantumness of Correlations. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 88, p. 017901–017904, 2001.

PINTO, João Paulo Gâmbaro. **Estudo da dinâmica dissipativa da discórdia quântica**: Análise da mudança súbita na taxa de decaimento da discórdia quântica. 2014. 85 p. Dissertação (Mestrado em Física de Materiais) – Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto.

PLANCK, Max. Ueber das Gesetz Energieverteilung im Normalspectrum. **Annalen der Physik**, WILEY-VCH Verlag, v. 309, p. 3553–3563, 1901.

RIVAS, Ángel; HUELGA, Susana F.; PLENIO, Martin Bodo. Entanglement and Non-Markovianity of Quantum Evolutions. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 105, p. 050403–050406, 2010.

SANTOS FERREIRA, Johnny Syllas dos. **Emaranhamento e Discórdia em sistemas puros multipartidos**. 2015. 74 p. Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal do Mato Grosso, Cuiabá.

SHANNON, Claude Elwood. A Mathematical Theory of Communication. **Bell System Technical Journal**, v. 27, p. 379–423, 1948.

SHANNON, Claude Elwood; WEAVER, Warren. **The Mathematical Theory of Communication**. Urbana: The University of Illinois Press, 1964. 125 p.

SHOR, Peter Williston. Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer. **SIAM Review**, Society for Industrial and Applied Mathematics, v. 41, p. 02303–02332, 2006.

WHAT is the difference between realism in locality, and counterfactual definiteness? 1 mai. 2016. Disponível em: <<http://physics.stackexchange.com/q/253291>>. Acesso em: 22 dez. 2016.

WOOTTERS, William K. Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 80, p. 102245–102248, 1998.

YANOFSKY, Noson S.; MANNUCCI, Mirco A. **Quantum Computing for Computer Scientists**. New York: Cambridge University Press, 2008. 384 p.

ANEXO A – Método de Adams-Bashforth-Moulton para Equações Diferenciais Ordinárias

Os métodos de Euler, Heun, Taylor e Runge-Kutta são chamados métodos de passo único porque usam apenas a informação de um ponto anterior para calcular o ponto seguinte, ou seja, apenas o ponto inicial (t_0, y_0) é usado para calcular (t_1, y_1) e no geral y_k é necessário para calcular y_{k+1} . Depois de vários pontos serem encontrados, é possível usar vários pontos anteriores no cálculo. O método de Adams-Bashforth-Moulton usa y_{k-3} , y_{k-2} , y_{k-1} e y_k no cálculo de y_{k+1} . Este método não é autoinicializável; quatro pontos iniciais (t_0, y_0) , (t_1, y_1) , (t_2, y_2) e (t_3, y_3) devem ser dados para gerar os pontos $\{(t_k, y_k)\}_{k=4}^m$.

Uma característica desejável de um método multipasso é que o erro de truncamento local pode ser determinado e um termo de correção pode ser incluído, o que melhora a acurácia da resposta a cada passo. Também, é possível determinar se o tamanho do passo é pequeno o bastante para se obter um valor preciso para y_{k+1} , mas grande o bastante para que cálculos desnecessários e demorados sejam eliminados. Se o código da subrotina estiver otimizado, então a combinação de preditor e corretor exige apenas duas avaliações da função $f(t, y)$ por passo.

Teorema 1 (Método Adams-Bashforth-Moulton) *Presumindo que $f(t, y)$ é contínuo e satisfaz uma condição de Lipschitz na variável y e considerando o problema de valor inicial $y' = f(t, y)$ com $y(a) = t_0 = \alpha$, sobre o intervalo $a \leq t \leq b$, o método Adams-Bashforth-Moulton usa as fórmulas $t_{k+1} = t_k + h$, o preditor*

$$p_{k+1} = y_k + \frac{h}{24} (-9f_{k-3} + 37f_{k-2} - 59f_{k-1} + 55f_k)$$

e o corretor

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{24} (f_{k-2} - 5f_{k-1} + 19f_k + 9f[t_{k+1}, p_{k+1}]), \quad k = 3, 4, \dots, m-1$$

como solução aproximada da equação diferencial usando o conjunto discreto de pontos

$$\{(t_k, y_k)\}_{k=0}^m.$$

Observação 1 *O método Adams-Bashforth-Moulton não é autoinicializável. Três valores iniciais adicionais y_1 , y_2 e y_3 devem ser dados. Eles normalmente são calculados usando o método Runge-Kutta (MODULE... , 2003).*