

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA "JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
FACULDADE DE CIÊNCIAS - CAMPUS BAURU
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E METEOROLOGIA
BACHARELADO EM FÍSICA DE MATERIAIS

FELIPE PELETEIRO DE SOUZA

**ESTIMANDO FUNÇÕES DE DENSIDADE ESPECTRAL COM
APRENDIZAGEM DE MÁQUINA**

BAURU
2025

FELIPE PELETEIRO DE SOUZA

**ESTIMANDO FUNÇÕES DE DENSIDADE ESPECTRAL COM
APRENDIZAGEM DE MÁQUINA**

Trabalho de Conclusão de Curso do Curso
Bacharelado em Física de Materiais da Univer-
sidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita
Filho”, Faculdade de Ciências, Campus Bauru.
Orientador: Prof. Dr. Felipe Fernandes Fanchini

BAURU
2025

S729e

Souza, Felipe Peleteiro de

Estimando funções de densidade espectral com aprendizagem de máquina / Felipe Peleteiro de Souza. -- Bauru, 2025

35 p. : tabs., fotos

Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado - Física) -
Universidade Estadual Paulista (UNESP), Faculdade de Ciências,
Bauru

Orientador: Felipe Fernandes Fanchini

1. Física. 2. Sistemas Quânticos Abertos. 3. Aprendizagem de
Máquina. 4. Densidade Espectral. 5. Inteligência Artificial. I. Título.

ATA DE DEFESA PÚBLICA DO TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Aos 8 dias do mês de dezembro de 2025, às 10h00, em sessão pública em formato presencial\virtual via Google Meet, na presença da Banca Examinadora presidida pelo(a) **Prof. Dr. Felipe Fernandes Fanchini** composta pelos examinadores André Luiz Malvezzi e Felipe Rodrigues Perche Mahlow, o(a) aluno(a) **Felipe Peleteiro de Souza** apresentou o trabalho de conclusão de curso intitulado: **"ESTIMANDO FUNÇÕES DE DENSIDADE ESPECTRAL COM APRENDIZAGEM DE MÁQUINA"**, como requisito curricular indispensável para a integralização do curso de Física – Bacharelado em Física de Materiais. Após reunião em sessão reservada, a Banca Examinadora deliberou e decidiu pela **APROVAÇÃO** do referido trabalho, divulgando o resultado formalmente ao aluno e demais presentes e eu, na qualidade de Presidente da Banca, lavrei a presente ata que será assinada por mim, pelos demais examinadores e pelo aluno.

Documento assinado digitalmente



FELIPE FERNANDES FANCHINI
Data: 08/12/2025 21:46:49-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Orientador

Documento assinado digitalmente



ANDRE LUIZ MALVEZZI
Data: 08/12/2025 17:57:43-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Membro 1

Documento assinado digitalmente



FELIPE RODRIGUES PERCHE MAHLOW
Data: 08/12/2025 11:27:06-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Membro 2

Documento assinado digitalmente



FELIPE PELETEIRO DE SOUZA
Data: 08/12/2025 18:01:48-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Aluno (a)

Dedico este trabalho ao meu pai (in memoriam), que não pôde estar aqui para acompanhar este ciclo que se encerra, mas cuja luz nunca se apagou e subsiste iluminando o caminho; e à minha mãe, minha irmã e a todos os meus amigos, cuja presença e apoio foram fundamentais em cada momento.

Agradecimentos

Ao meu orientador Prof. Dr. Felipe Fernandes Fanchini, por estar sempre disposto a compartilhar seu conhecimento e sabedoria, como cientista e como amigo, e pelo incentivo à exploração de ideias que outrora pareciam incompreensíveis, mas que hoje norteiam todo este trabalho e minha vida acadêmica.

Ao Prof. Dr. Ariel Norambuena, que orientou o desenvolvimento deste trabalho durante meu estágio de pesquisa no Chile e me recebeu de portas abertas, mostrando sempre preocupação em não só guiar meu desenvolvimento científico mas também em me apresentar a encantadora cultura local.

Ao meu amigo João Victor Shigetsugo Kawanami Lima, que foi meu principal parceiro de pesquisa ao longo de toda a graduação e que esteve ao meu lado durante todos os momentos daqueles três árduos (mas saudosos) meses em Santiago.

Ao Prof. Dr. André Luiz Malvezzi, que me guiou pelo hermético caminho da mecânica quântica, mantendo-se sempre aberto a não só conversas científicas, mas também filosóficas.

Ao Dr. Felipe Rodrigues Perche Mahlow, por todas as conversas e conselhos no laboratório, que nortearam muitas decisões para o futuro.

A todos os professores, técnicos e funcionários da Faculdade de Ciências (FC) da Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"(UNESP), principalmente ao corpo docente do Departamento de Física e Meteorologia, que foram cruciais para o meu desenvolvimento.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), pelo apoio financeiro e pelo incentivo à pesquisa (processos 2023/07660-8 e 2024/20249-8).

Aos autores cujas obras foram fundamentais para a construção do conhecimento aqui aplicado, em especial Michael Nielsen, Isaac Chuang, Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë, Heinz-Peter Breuer e Francesco Petruccione.

Tudo o que a mente compreende sob a perspectiva da eternidade não o compreende por conceber a existência atual e presente do corpo, mas por conceber a essência do corpo sob a perspectiva da eternidade.

Baruch Spinoza

Resumo

A compreensão da decoerência quântica é fundamental para o avanço das tecnologias quânticas, pois esse fenômeno limita a coerência de sistemas de informação quântica. Neste trabalho, estudamos os canais de *Amplitude Damping* (AD) e *Pure Dephasing* (PD), descritos por funções de densidade espectral $J(\omega)$, e utilizamos aprendizagem de máquina para estimar seus parâmetros a partir de sinais sintéticos. Foram testados os modelos Random Forest (RF) e Extreme Gradient Boosting (XGB), avaliando suas capacidades de reconstruir as propriedades do sistema mesmo na presença de ruído. Os resultados mostram que os métodos conseguem inferir com boa acurácia as características da interação sistema-reservatório, reduzindo o número de medições necessárias e demonstrando o potencial da aprendizagem de máquina na caracterização de sistemas quânticos abertos.

Palavras-chave: sistemas quânticos abertos; densidade espectral; decoerência quântica; aprendizado de máquina; inteligência artificial.

Abstract

Understanding quantum decoherence is essential for advancing quantum technologies, as it limits the coherence of quantum information systems. In this work, we study Amplitude Damping (AD) and Pure Dephasing (PD) channels described by their spectral density functions $J(\omega)$, and apply machine learning to estimate their parameters from synthetic signals. We evaluate Random Forest (RF) and Extreme Gradient Boosting (XGB) models, testing their ability to reconstruct system properties under noisy conditions. The results show that both methods accurately infer system–bath interaction characteristics while reducing the number of required measurements, demonstrating the potential of machine learning for characterizing open quantum systems.

Keywords: open quantum systems; spectral density; quantum decoherence; machine learning; artificial intelligence.

Lista de figuras

Figura 1 – Comparação do MAPE (%) para os cenários Ideal ($\epsilon = 0$) e Ruidoso ($\epsilon = 0,05$) em função do número de pontos (N) para o Pure Dephasing. Fonte: Elaboração própria.	28
Figura 2 – Comparação do MAPE (%) para os cenários Ideal ($\epsilon = 0$) e Ruidoso ($\epsilon = 0,05$) em função do número de pontos (N) para o Amplitude Damping. Fonte: Elaboração própria.	29
Figura 3 – Comparação de curvas de $f(t)$ para (a) <i>Pure Dephasing</i> ($\xi = [1,0; 3,0; 1,0]$) e (b) <i>Amplitude Damping</i> ($\xi = [0,8; 0,3; 1,0]$) em regimes não-Markovianos. Fonte: Elaboração própria.	30
Figura 4 – Previsões do modelo de Aprendizagem de Máquina para a razão γ_0/λ para $N = 200$. Fonte: Elaboração própria.	31

Lista de tabelas

Tabela 1 – Comparação do MAPE (%) para os cenários Ideal ($\epsilon = 0$) e Ruidoso ($\epsilon = 0,05$) em função do número de pontos (N) para o Pure Dephasing. Fonte: Elaboração própria.	27
Tabela 2 – Comparação do MAPE (%) para os cenários Ideal ($\epsilon = 0$) e Ruidoso ($\epsilon = 0,05$) em função do número de pontos (N) para o Amplitude Damping. Fonte: Elaboração própria.	29

Lista de abreviaturas e siglas

AD	<i>Amplitude Damping (Amortecimento de Amplitude)</i>
PD	<i>Pure Dephasing (Decoerência Pura)</i>
MAPE	<i>Mean Absolute Percentage Error (Erro Percentual Absoluto Médio)</i>
MSE	<i>Mean Squared Error (Erro Quadrático Médio)</i>
ML	<i>Machine Learning (Aprendizagem de Máquina)</i>
RF	<i>Random Forest</i>
XGB	<i>Extreme Gradient Boosting</i>

Sumário

1	INTRODUÇÃO	13
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	15
2.1	Mecânica Quântica e Decoerência	15
2.2	Sistemas Quânticos Abertos	16
2.3	O Modelo Spin-Bóson	16
2.4	Processos de decoerência: <i>Pure Dephasing</i> e <i>Amplitude Damping</i>	17
2.4.1	<i>Pure Dephasing</i>	17
2.4.2	<i>Amplitude Damping</i>	19
2.4.3	<i>Forward Maps</i>	20
2.5	Aprendizagem de Máquina	21
2.5.1	<i>Random Forest</i> (RF)	22
2.5.2	<i>Extreme Gradient Boosting</i> (XGB)	22
3	METODOLOGIA	24
3.1	Gerando dados simulados	24
3.2	Treinamento dos modelos	25
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	27
4.1	Resultados para o canal de <i>Pure Dephasing</i> com RF	27
4.2	Resultados para o canal <i>Amplitude Damping</i> com XGB	28
5	CONCLUSÃO	32
	REFERÊNCIAS	33

1 Introdução

A mecânica quântica, desde o seu surgimento no início do século XX, revolucionou a forma como compreendemos a natureza, descrevendo fenômenos em escalas microscópicas que não podem ser explicados pela física clássica (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOE, 1991). Através de princípios como a superposição e o emaranhamento, essa teoria fornece as bases para o funcionamento de diversas tecnologias emergentes, como computadores quânticos, sensores de alta precisão e sistemas de comunicação seguros. No entanto, a aplicação prática dessas propriedades enfrenta um dos maiores desafios da física atual: a interação inevitável entre um sistema quântico e o seu ambiente (BREUER; PETRUCCIONE, 2007).

Ao contrário dos sistemas isolados idealizados pela teoria quântica tradicional, os sistemas reais estão sempre sujeitos a perturbações externas. Essa interação com o meio provoca processos de dissipação e perda de coerência; esses fenômenos são conhecidos como decoerência quântica (SCHLOSSHAUER, 2019). A decoerência compromete a manutenção de estados quânticos puros e, conseqüentemente, a viabilidade de dispositivos quânticos estáveis. O estudo desses efeitos dá origem ao campo dos sistemas quânticos abertos, cujo objetivo é compreender e modelar a influência do ambiente sobre a dinâmica do sistema de interesse.

Diversos métodos teóricos e experimentais têm sido desenvolvidos para descrever essa interação, desde aproximações fenomenológicas até modelos microscópicos baseados em princípios fundamentais. Entre esses modelos, o formalismo spin-bóson se destaca por sua simplicidade e capacidade de capturar os aspectos essenciais da decoerência quântica, sendo um dos modelos mais utilizados para descrever a interação entre um sistema quântico simples e seu ambiente (BREUER; PETRUCCIONE, 2007). Nesse modelo, o sistema de interesse é representado por um *qubit*, ou seja, um sistema de dois níveis que pode corresponder, por exemplo, ao spin de um elétron ou a dois estados eletrônicos de um átomo, enquanto o ambiente é modelado como um conjunto contínuo de osciladores harmônicos, também chamados de modos bosônicos. A interação entre o qubit e esses modos descreve os processos de dissipação e decoerência, que fazem com que a informação quântica seja gradualmente perdida para o meio.

Nesse contexto, torna-se fundamental caracterizar como o ambiente afeta o sistema, o que é feito por meio da função de densidade espectral, que descreve a distribuição de modos do banho e a intensidade de seu acoplamento ao sistema. Em aplicações práticas, como computação quântica, metrologia e simulação de materiais, o conhecimento preciso da densidade espectral é essencial para controlar qubits, minimizar a decoerência, preservar estados quânticos por mais tempo e compreender os mecanismos de ruído. No entanto, os métodos tradicionais para obter a densidade espectral são computacional e experimentalmente

custosos, exigindo um grande número de medidas.

Uma proposta promissora consiste na aplicação de técnicas de aprendizado de máquina (machine learning) ([GOODFELLOW; BENGIO; COURVILLE, 2016](#)) para inferir a densidade espectral a partir de dados acessíveis experimentalmente, como curvas de coerência ou medições de observáveis ao longo do tempo. Modelos treinados com dados simulados ou reais podem aprender padrões complexos na resposta do sistema ao ruído, permitindo a reconstrução da densidade espectral sem a necessidade de reconstrução explícita da matriz densidade ou da função de autocorrelação temporal.

Em cenários práticos, determinar essa função com precisão é crucial para tarefas como controle quântico, mitigação de erros e caracterização do ambiente. Além das aplicações em informação quântica, a modelagem da densidade espectral também se mostra relevante no estudo de materiais, sendo fundamental no estudo de interações defeito-fônon em materiais sólidos, o que impacta a engenharia de novos materiais e interfaces para sensores quânticos ([NORAMBUENA et al., 2020](#)).

Neste trabalho, investigamos uma abordagem que utiliza algoritmos de aprendizagem de máquina para estimar os parâmetros que definem a densidade espectral do ambiente a partir de medições experimentalmente acessíveis. Iniciaremos nossa discussão introduzindo os fundamentos teóricos mais importantes para este trabalho, passando por conceitos básicos de mecânica quântica e decoerência, pela teoria dos sistemas quânticos abertos e os modelos teóricos dos canais de ruído estudados e fundamentando os modelos de aprendizagem de máquina escolhidos. Após isso, discutiremos os detalhes da metodologia empregada e os resultados obtidos, finalizando com as conclusões.

2 Fundamentação Teórica

Este capítulo estabelece o embasamento teórico necessário para o desenvolvimento do trabalho. Inicialmente, discutem-se os conceitos fundamentais de Mecânica Quântica e Sistemas Quânticos Abertos, com ênfase no Modelo Spin-Bóson e nos processos de decoerência *Pure Dephasing* e *Amplitude Damping*. Na sequência, são apresentados os mapas dinâmicos (*Forward Maps*) que descrevem a evolução temporal desses sistemas e, por fim, introduzem-se os algoritmos de Aprendizado de Máquina utilizados para a caracterização do ruído.

2.1 Mecânica Quântica e Decoerência

A mecânica quântica descreve a evolução dos sistemas físicos a partir do princípio de superposição, segundo o qual um estado quântico pode existir simultaneamente em diferentes configurações. Essa propriedade é formalmente representada pelo vetor de estado $|\psi\rangle$ ou, de forma mais geral, pela matriz densidade ρ , que permite descrever tanto estados puros quanto mistos. A evolução temporal de sistemas isolados é regida pela equação de Schrödinger, que é unitária e, portanto, conserva a coerência entre as componentes da superposição (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOE, 1991).

Na prática, porém, nenhum sistema é completamente isolado: sempre há algum tipo de interação com o ambiente externo; por exemplo, moléculas de ar, vibrações mecânicas ou ruído eletromagnético. Essa interação provoca a perda gradual da coerência quântica, um processo chamado decoerência. Ocorre quando o sistema e o ambiente tornam-se emaranhados de tal forma cada estado do sistema passa a estar correlacionado com um estado diferente (e ortogonal) do ambiente.

Quando “ignoramos” o ambiente (o que sempre fazemos ao observar apenas o sistema), as fases relativas entre os estados do sistema se tornam inobserváveis. A interação com o ambiente provoca o decaimento dos elementos fora da diagonal da matriz densidade reduzida do sistema (as coerências). Com o desaparecimento desses termos de interferência, o estado do sistema transita de uma superposição coerente para uma mistura estatística. Consequentemente, o sistema perde a capacidade de exibir efeitos de interferência quântica localmente, passando a ser descrito por uma distribuição de probabilidades clássica. A decoerência é, portanto, um dos principais obstáculos para as tecnologias quânticas, pois limita o tempo durante o qual a informação quântica pode ser preservada (SCHLOSSHAUER, 2019).

2.2 Sistemas Quânticos Abertos

Para descrever a dinâmica de sistemas que interagem com um meio externo, utiliza-se a teoria dos sistemas quânticos abertos. Nessa abordagem, o sistema de interesse (s) é acoplado a um reservatório ou banho (b), composto por um grande número de graus de liberdade. Embora o sistema total, composto pelo sistema de interesse e pelo ambiente, evolua de forma unitária (preservando a norma e a coerência) conforme a equação de Schrödinger para o estado combinado $\rho(t)$, o que se observa experimentalmente é apenas a parte referente ao sistema. Para descrever sua dinâmica, é necessário eliminar os graus de liberdade do ambiente, operação conhecida como traço parcial. Assim, define-se a matriz densidade reduzida

$$\rho_s(t) = \text{Tr}_b[\rho(t)] \quad (2.1)$$

que contém toda a informação acessível sobre o sistema. No entanto, ao realizar esse traço, perdem-se as correlações quânticas e o emaranhamento entre sistema e ambiente, o que faz com que a evolução de $\rho_s(t)$ deixe de ser unitária. Essa evolução efetiva é descrita por uma equação mestra, que inclui termos dissipativos e de decoerência responsáveis pela perda de energia e de coerência quântica. A equação mestra, portanto, fornece uma descrição estatística e irreversível da dinâmica do sistema, mesmo que a evolução global permaneça determinística e reversível (BREUER; PETRUCCIONE, 2007).

Em situações em que a correlação entre sistema e ambiente decai rapidamente, pode-se adotar a aproximação de Markov, levando à equação de Lindblad (LINDBLAD, 1976). No entanto, quando há efeitos de memória (dinâmica não-Markoviana), é necessário um tratamento mais rigoroso, muitas vezes envolvendo integrais de convolução dependentes da função de densidade espectral $J(\omega)$, que caracteriza o acoplamento entre o sistema e os modos do ambiente.

Em grande parte das aplicações físicas, a dinâmica não-Markoviana surge de forma natural quando o sistema quântico interage com um ambiente bosônico estruturado, cuja influência é codificada na densidade espectral $J(\omega)$, definida abaixo. Por essa razão, modelos microscópicos que descrevem explicitamente o acoplamento entre um qubit e um banho de osciladores harmônicos constituem a base para derivar, analisar e simular tanto os regimes Markovianos quanto os não-Markovianos. Dentre esses modelos, o mais prototípico é o modelo spin-bóson, cuja formulação apresentamos a seguir.

2.3 O Modelo Spin-Bóson

O modelo spin-bóson é uma das formulações mais fundamentais e versáteis para o estudo de sistemas quânticos abertos (WEISS, 1999). Nele, o sistema é representado por um sistema quântico de dois níveis (ou *qubit*), descrito pelo Hamiltoniano

$$\hat{H}_s = \frac{\omega_0}{2} \hat{\sigma}_z \otimes \mathbb{1}_b. \quad (2.2)$$

A matriz de Pauli $\hat{\sigma}_z = |1\rangle\langle 1| - |0\rangle\langle 0|$ atua no espaço do *qubit*, cuja base é $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. O ambiente, por sua vez, é modelado como um conjunto de osciladores harmônicos independentes, com Hamiltoniano

$$\hat{H}_b = \mathbb{1}_s \otimes \sum_k \omega_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \quad (2.3)$$

onde a_k^\dagger e a_k são os operadores de criação e aniquilação dos modos bosônicos do banho. O acoplamento entre sistema e ambiente é dado por um termo de interação do tipo

$$\hat{V}_I = \sum_k \hbar (g_k \hat{\sigma}_x a_k^\dagger + g_k^* \hat{\sigma}_x a_k) \quad (2.4)$$

ou variações equivalentes dependendo do tipo de ruído estudado, onde o coeficiente g_k representa a intensidade de acoplamento entre o *qubit* e o modo bosônico k do banho, caracterizado pela frequência ω_k .

A informação sobre como cada modo do banho interage com o sistema é condensada na função de densidade espectral

$$J(\omega) = \sum_k |g_k|^2 \delta(\omega - \omega_k) \quad (2.5)$$

. Essa função desempenha um papel central na descrição de fenômenos dissipativos e de decoerência, determinando o comportamento temporal da evolução do *qubit*.

2.4 Processos de decoerência: *Pure Dephasing* e *Amplitude Damping*

Ao interagir com o ambiente, um sistema quântico aberto sofre efeitos de decoerência e dissipação, que reduzem a coerência quântica e a energia armazenada no sistema. Em modelos de dois níveis (*qubits*), destacam-se dois canais de ruído quântico fundamentais: *pure dephasing* (PD) e *amplitude damping* (AD). Cada um deles descreve uma forma distinta de perda de informação quântica e está associado a diferentes tipos de interação entre o sistema e o banho bosônico.

2.4.1 *Pure Dephasing*

O canal de *pure dephasing* descreve a perda de coerência sem troca de energia com o ambiente. Nesse caso, os estados de energia do sistema permanecem populados de forma constante, mas suas fases relativas sofrem flutuações devido ao acoplamento a graus de liberdade externos. Consideremos o modelo spin-bóson de PD, descrito pelo Hamiltoniano

$$\hat{H}_{PD} = \hat{H}_s + \hat{H}_b + \hat{V}_{PD}, \quad (2.6)$$

em que o termo do sistema quântico é dado por (2.2) e o termo do banho bosônico é dado por (2.3). O acoplamento entre o sistema e o banho é descrito pelo Hamiltoniano de interação ($\hbar = 1$)

$$\hat{V}_{\text{PD}} = \hat{\sigma}_z \otimes \sum_k (g_k \hat{a}_k + g_k^* \hat{a}_k^\dagger), \quad (2.7)$$

onde g_k representam as constantes de acoplamento entre o sistema e o modo k do banho. Essas constantes determinam a intensidade com que o sistema interage com cada modo do reservatório bosônico e estão relacionadas à densidade espectral $J(\omega)$, conforme definido na Eq. (2.5).

Apesar de sua aparente simplicidade, o modelo de *pure dephasing* captura de forma exata fenômenos físicos relevantes, como a dinâmica não markoviana de centros de cor acoplados a fônons orbitais (NORAMBUENA et al., 2020), bem como o comportamento de discórdia quântica invariável no tempo (HAIKKA; JOHNSON; MANISCALCO, 2013).

Para um banho térmico descrito pelo estado

$$\hat{\sigma}_b = \frac{e^{-\beta \hat{H}_b}}{\text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}_b}]}, \quad (2.8)$$

com $\beta = (k_B T)^{-1}$ em que T é a temperatura e k_B a constante de Boltzmann, a dinâmica exata do sistema é dada por uma equação de Lindblad dependente do tempo:

$$\dot{\hat{\rho}}_{\text{PD}} = \frac{\gamma_{\text{PD}}(t)}{2} [\hat{\sigma}_z \hat{\rho}_{\text{PD}} \hat{\sigma}_z - \hat{\rho}_{\text{PD}}], \quad (2.9)$$

como mostrado em (HAIKKA; JOHNSON; MANISCALCO, 2013; ŁUCZKA, 1990).

Neste trabalho, adotamos a forma analítica

$$J(\omega, \boldsymbol{\xi}) = 2\alpha \omega_c^{1-s} \omega^s e^{-\omega/\omega_c} \quad (2.10)$$

para a densidade espectral do PD, em que $\boldsymbol{\xi} = [\alpha, s, \omega_c]$, onde α é o parâmetro de acoplamento que mede a intensidade da interação sistema-banho, ω_c é a frequência de corte que define a escala máxima de energia do reservatório, e s é o expoente que determina o regime espectral do ambiente. Essa parametrização é amplamente utilizada na literatura por permitir descrever diferentes tipos de banhos: para $s < 1$, o espectro é sub-ôhmico, com predominância de modos de baixa frequência; para $s = 1$, é ôhmico, representando um acoplamento linear típico de muitos sistemas físicos; e para $s > 1$, o espectro é supra-ôhmico, onde as frequências altas exercem maior influência. A presença do fator exponencial $e^{-\omega/\omega_c}$ garante a convergência da integral e reflete o corte físico natural associado à estrutura do material ou ao limite de energia dos modos ambientais. Essa forma de $J(\omega)$ é especialmente adequada para modelar processos de decoerência em centros de cor em diamante e outros sistemas de estado sólido, nos quais o acoplamento com fônons apresenta comportamento ôhmico com supressão em altas frequências.

A taxa dependente do tempo é expressa como

$$\gamma_{\text{PD}}(t) = \int_0^\infty J(\omega) [2n(\omega) + 1] \sin(\omega t) d\omega, \quad (2.11)$$

onde $n(\omega) = [\exp(\beta\hbar\omega) - 1]^{-1}$ é o número médio de bósons no modo ω (distribuição de Bose-Einstein). Como o modelo de *pure dephasing* não altera as populações do *qubit* (ou seja, $\rho_{00}(t)$ e $\rho_{11}(t)$ permanecem constantes), o decaimento da coerência quântica torna-se o principal observável de interesse. De acordo com (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014), a coerência é definida como

$$C(t) = \sum_{i \neq j} |\rho_{ij}(t)|. \quad (2.12)$$

Experimentalmente, essa coerência pode ser reconstruída a partir das médias dos operadores de Pauli $\hat{\sigma}_x$ e $\hat{\sigma}_y$ (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014):

$$f_{\text{PD}}(t) = \sqrt{\langle \hat{\sigma}_x(t) \rangle^2 + \langle \hat{\sigma}_y(t) \rangle^2} = 2|\rho_{01}(0)| e^{-G(t)}, \quad (2.13)$$

$$G(t) = \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega^2} \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right) [1 - \cos(\omega t)] d\omega. \quad (2.14)$$

Assim, a função $f_{\text{PD}}(t) = 2|\rho_{10}(t)|$ representa diretamente a coerência quântica do modelo de *pure dephasing*.

2.4.2 Amplitude Damping

O processo de *amplitude damping* (AD), por sua vez, representa a troca de energia entre o sistema e o ambiente. Fisicamente, ele modela processos de emissão de fótons, nos quais o *qubit* decai do estado excitado $|1\rangle$ para o estado fundamental $|0\rangle$, liberando um quantum de energia no banho. Esse tipo de processo é descrito por um Hamiltoniano $\hat{H}_{\text{AD}} = \hat{H}_s + \hat{H}_b + \hat{V}_{\text{AD}}$, em que \hat{H}_s e \hat{H}_b são os mesmos que no canal de PD e o Hamiltoniano de interação é dado por

$$\hat{V}_{\text{AD}} = \sum_k \left(g_k \hat{\sigma}_+ \otimes \hat{a}_k + g_k^* \hat{\sigma}_- \otimes \hat{a}_k^\dagger \right), \quad (2.15)$$

onde $\hat{\sigma}_+ = (\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y)/2$ e $\hat{\sigma}_- = (\hat{\sigma}_x - i\hat{\sigma}_y)/2$ são os operadores de absorção e emissão do *qubit* e a_k e a_k^\dagger são os operadores de criação e aniquilação dos modos bosônicos do ambiente.

Neste contexto, a taxa de relaxação depende da função de densidade espectral $J(\omega)$, que codifica tanto a distribuição de frequências dos modos do banho quanto a intensidade de acoplamento g_k . Uma escolha comum e fisicamente relevante é a densidade espectral Lorentziana, dada por

$$J(\omega, \boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma_0 \lambda^2}{(\omega - \omega_b)^2 + \lambda^2}, \quad (2.16)$$

em que $\boldsymbol{\xi} = [\gamma_0, \lambda, \omega_b]$, onde γ_0 é relacionado à taxa de decaimento no regime de acoplamento fraco (Markoviano), λ é a largura de banda do espectro e ω_b é a frequência bosônica acoplada ao *qubit*. Valores pequenos de λ indicam banhos não-Markovianos, com memória temporal longa, enquanto valores grandes correspondem ao limite Markoviano (FANCHINI et al., 2021).

Estudamos o processo de emissão espontânea de Wigner-Weisskopf no caso de uma única excitação, em que o operador número de partículas é dado por

$$\hat{N} = \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- + \sum_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (2.17)$$

Como $[\hat{N}, \hat{H}_{AD}] = 0$, a dinâmica se restringe ao subespaço de uma excitação, descrito pelo conjunto de estados $\{|0\rangle \otimes |0_k\rangle, |1\rangle \otimes |0_k\rangle, |0\rangle \otimes |1_k\rangle\}$, onde $\{|0_k\rangle, |1_k\rangle\}$ formam a base bosônica correspondente a um modo com uma única excitação. A função de onda total do sistema composto é escrita como

$$|\Psi(t)\rangle = c_0(t)|0\rangle \otimes |0_k\rangle + c_1(t)|1\rangle \otimes |0_k\rangle + \sum_k c_k(t)|0\rangle \otimes |1_k\rangle, \quad (2.18)$$

com condição inicial $\hat{\rho}(0) = |1\rangle\langle 1| \otimes |0_k\rangle\langle 0_k|$. A partir dessa construção, obtém-se a dinâmica exata do modelo de AD:

$$\dot{\hat{\rho}}_{AD} = -iS(t)[\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-, \hat{\rho}_{AD}] + \gamma(t) \left[\hat{\sigma}_- \hat{\rho}_{AD} \hat{\sigma}_+ - \frac{1}{2} \{ \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_-, \hat{\rho}_{AD} \} \right], \quad (2.19)$$

onde $\hat{\rho}_{AD} = \text{Tr}_b[|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|]$ é a matriz densidade reduzida do sistema. As funções $S(t)$ e $\gamma(t)$ representam, respectivamente, o *Lamb shift* e a taxa de decaimento instantânea, sendo definidas como

$$S(t) = -\Im \left\{ \frac{\dot{c}_1(t)}{c_1(t)} \right\}, \quad (2.20)$$

$$\gamma(t) = -\Re \left\{ \frac{\dot{c}_1(t)}{c_1(t)} \right\}. \quad (2.21)$$

Como as populações evoluem neste modelo, um observável adequado para caracterizar o processo é a diferença de populações,

$$f_{AD}(t) = \langle \hat{\sigma}_z \rangle = 2|c_1(t)|^2 - 1, \quad (2.22)$$

$$\dot{c}_1(t) = -\int_0^t c_1(\tau) \left[\int_0^\infty e^{i(\omega_0 - \omega)(t - \tau)} J(\omega) d\omega \right] d\tau, \quad (2.23)$$

onde $f_{AD}(t) = \rho_{11}(t) - \rho_{00}(t)$ expressa a diferença entre as populações dos estados excitado e fundamental.

2.4.3 Forward Maps

As Equações (2.13) e (2.22) definem os chamados *forward maps* $f_m(t) \mapsto J(\omega)$, que relacionam sinais experimentais $f_m(t)$ à função de densidade espectral, com $m \in \{\text{PD}, \text{AD}\}$. Quando disponíveis, esses mapeamentos diretos são extremamente úteis para o treinamento e a calibração de modelos baseados em inteligência artificial, permitindo reconstruir $J(\omega)$ a partir de dados experimentais de forma mais robusta e fisicamente consistente. Em temperatura nula ($T = 0$), as expressões para os sinais dos modelos de PD e AD assumem formas analíticas convenientes (HAIKKA; JOHNSON; MANISCALCO, 2013; DINANI et al., 2022). Obtemos

$$f_{\text{PD}}(t) = 2|\rho_{10}(0)| \mathcal{F}_{\text{PD}}(t), \quad (2.24)$$

$$f_{\text{AD}}(t) = 2\rho_{11}(0) \mathcal{F}_{\text{AD}}(t) - 1, \quad (2.25)$$

onde as funções $\mathcal{F}_{\text{PD}}(t)$ e $\mathcal{F}_{\text{AD}}(t)$ descrevem a evolução temporal da coerência e da população, respectivamente:

$$\mathcal{F}_{\text{PD}}(t) = \exp\left(2\alpha \Gamma(s) \int_0^{\omega_c t} \frac{\sin(s \tan^{-1}(x))}{[1+x^2]^{s/2}} dx\right), \quad (2.26)$$

$$\mathcal{F}_{\text{AD}}(t) = \exp(-\lambda t) \left| \cosh\left(\frac{dt}{2}\right) + \frac{\Lambda}{d} \sinh\left(\frac{dt}{2}\right) \right|^2, \quad (2.27)$$

com os parâmetros definidos como $d = \sqrt{\Lambda^2 - 4\gamma_0\lambda}$, $\Lambda = \lambda - i\delta$, $\delta = \omega_0 - \omega_b$, sendo $\Gamma(s)$ a função Gama.

Esses sinais constituem a base para a reconstrução da função de densidade espectral $J(\omega)$. Em outras palavras, o problema de estimar a densidade espectral se traduz nesse contexto como um problema de estimar seus parâmetros ξ . No entanto, essa reconstrução representa um problema inverso complexo, pois envolve recuperar $J(\omega)$ a partir de medidas ruidosas dos sinais experimentais. A fim de abordar esse desafio, propomos o uso de técnicas de aprendizado de máquina para estimar a densidade espectral de forma eficiente e robusta. A próxima seção apresenta a metodologia adotada, detalhando a geração dos dados de treinamento, a arquitetura dos modelos utilizados e o processo de otimização empregado para inferir $J(\omega)$ a partir dos sinais simulados dos modelos quânticos.

2.5 Aprendizagem de Máquina

A aprendizagem de máquina (do inglês *machine learning*, ML) é uma área da inteligência artificial voltada ao desenvolvimento de algoritmos capazes de identificar padrões e extrair relações complexas a partir de dados. Em vez de depender de modelos analíticos completos, esses algoritmos aprendem com exemplos, ajustando seus parâmetros internos para reproduzir o comportamento observado em um conjunto de treinamento (??).

No contexto deste trabalho, a aprendizagem de máquina é aplicada para inferir a função de densidade espectral $J(\omega)$ a partir de sinais experimentais ou simulados provenientes dos modelos de PD e AD. Como a relação entre $J(\omega)$ e as respostas temporais $f(t)$ é altamente não linear e dependente do regime físico (markoviano ou não-markoviano), o uso de técnicas de regressão supervisionada permite reconstruir a dinâmica do sistema quântico de forma eficiente e sem recorrer a aproximações perturbativas.

Um dos principais objetivos dessa abordagem é minimizar o número de medições necessárias para caracterizar o ambiente quântico. Em um contexto quântico, a necessidade de poucas medições é altamente desejável, pois cada medida destrói o estado quântico original, exigindo que o experimento seja repetido diversas vezes para a reconstrução estatística das variáveis de interesse. Esse processo implica alto custo tanto em tempo quanto em recursos

experimentais, especialmente em sistemas frágeis e de difícil controle. Métodos capazes de extrair informações confiáveis com um número reduzido de medições, portanto, representam um ganho significativo em eficiência, permitindo estimar os parâmetros físicos do sistema com menor demanda de preparação de estados e menor perturbação sobre a dinâmica quântica.

Diversos algoritmos de aprendizagem de máquina tiveram suas performances testadas durante o desenvolvimento deste trabalho, e foram selecionados os modelos com melhor performance em cada caso. Nas subseções seguintes, apresentamos as duas técnicas de regressão supervisionada adotadas neste trabalho: o *Random Forest* (RF), que demonstrou a melhor performance para o canal de PD, e o *Extreme Gradient Boosting* (XGB), que demonstrou a melhor performance para o canal de AD.

2.5.1 *Random Forest* (RF)

O *Random Forest* (RF) é um algoritmo de aprendizagem supervisionada baseado em um conjunto (*ensemble*) de árvores de decisão (HO, 1995). Cada árvore é treinada de forma independente sobre diferentes subconjuntos de dados e variáveis, de modo que o resultado final é obtido pela média das previsões individuais (no caso de regressão) ou pelo voto majoritário (no caso de classificação). Essa estrutura coletiva confere ao RF uma robustez natural contra ruído e reduz o risco de *overfitting* (sobreajuste), tornando-o adequado para problemas com relações complexas e não lineares entre variáveis.

No presente trabalho, o RF é empregado como um modelo de regressão para estimar os parâmetros espectrais que definem a função de densidade espectral $J(\omega)$. O treinamento é realizado a partir dos sinais simulados gerados para o canal de PD conforme descrito anteriormente. Cada árvore no conjunto busca capturar uma aproximação local entre os valores de $f(t)$ e os parâmetros físicos do modelo, e o resultado médio das árvores fornece uma estimativa global mais estável.

A escolha do RF se justifica por sua capacidade de generalização e pela interpretação física dos parâmetros de importância, que permitem identificar quais regiões temporais do sinal $f(t)$ mais contribuem para a reconstrução de $J(\omega)$. Além disso, como o algoritmo não requer suposições de linearidade nem normalização rígida dos dados, ele se adapta bem aos sinais experimentais ruidosos e às dinâmicas não-Markovianas típicas dos sistemas quânticos abertos.

Dessa forma, o RF atua como uma ferramenta eficiente para reduzir o número de medições necessárias na caracterização do ambiente quântico, permitindo inferir a densidade espectral com boa acurácia mesmo a partir de conjuntos de dados limitados.

2.5.2 *Extreme Gradient Boosting* (XGB)

O *Extreme Gradient Boosting* (XGB) é um algoritmo de aprendizagem supervisionada baseado no método de *boosting* de gradiente, em que múltiplas árvores de decisão são treinadas

de forma sequencial (CHEN; GUESTRIN, 2016). Diferentemente do *Random Forest*, onde as árvores são independentes, no XGB cada nova árvore é ajustada para corrigir os erros cometidos pelas anteriores, reduzindo gradualmente a função de custo. Esse processo gera um modelo altamente preciso e capaz de capturar relações complexas e não lineares nos dados.

No contexto deste trabalho, o XGB é utilizado como modelo de regressão para estimar os parâmetros espectrais (ξ) que caracterizam a função de densidade espectral $J(\omega)$ a partir do sinal $f(t)$. O algoritmo busca minimizar a diferença entre os sinais previstos e os obtidos, ajustando iterativamente os parâmetros do modelo segundo o gradiente da função de perda (3.3), de modo que a cada iteração novas árvores são adicionadas para compensar os resíduos das previsões anteriores.

O XGB se destaca por incorporar regularização explícita e otimizações numéricas que evitam o *overfitting* (sobreajuste), mantendo alto desempenho mesmo em conjuntos de dados reduzidos. Além disso, o método permite identificar as variáveis (ou regiões temporais de $f(t)$) que mais influenciam na previsão, fornecendo assim um vínculo interpretável entre o aprendizado estatístico e a física do processo de descoerência.

A aplicação do XGB neste trabalho tem como principal objetivo aprimorar a reconstrução de $J(\omega)$ e, conseqüentemente, reduzir o número de medidas experimentais necessárias para caracterizar o ambiente quântico. Sua natureza iterativa e capacidade de generalização tornam o XGB especialmente útil em cenários onde as dinâmicas não-Markovianas introduzem comportamentos sutis e dependentes do tempo nos sinais observáveis.

3 Metodologia

Neste capítulo descreveremos o fluxo de trabalho computacional adotado para a solução do problema de reconstrução de parâmetros da função de Densidade Espectral. A seção 3.1 detalha os procedimentos para a geração dos bancos de dados sintéticos, simulando a dinâmica dos sistemas físicos abordados. Em seguida, a seção 3.2 descreve as etapas de pré-processamento, a configuração dos hiperparâmetros e o protocolo de treinamento e validação dos modelos de regressão.

3.1 Gerando dados simulados

Para ambos os modelos, *pure dephasing* (PD) e *amplitude damping* (AD), os dados simulados foram gerados por amostragem de diferentes regimes físicos nos quais os sinais experimentais das Eqs. (2.26) e (2.27) são bem definidos. Dessa forma, o conjunto de dados cobre tanto comportamentos markovianos quanto não markovianos (FANCHINI et al., 2021).

Com o objetivo de reproduzir condições experimentais mais realistas, foi adicionado ruído gaussiano aos sinais teóricos. Para cada instante de tempo discreto t_i , foi somada uma variável aleatória $\delta_i \in [-\epsilon, \epsilon]$ distribuída normalmente, de modo que

$$f_m(t_i) \longrightarrow f_m(t_i) + \delta_i, \quad (3.1)$$

onde $m \in \{\text{PD}, \text{AD}\}$. Assim, o conjunto de dados sintético para cada modelo pode ser definido como

$$\mathcal{D}_m \equiv \{t_i, f_m(t_i) + \delta_i\}_{i=1}^N, \quad (3.2)$$

onde N é o número total de medidas realizadas, sendo estas uniformemente espaçadas num intervalo $t_i \in [0.1, 10]$, em unidades de ω_0^{-1} , que se justifica por se mostrar um intervalo consistentemente expressivo da dinâmica dos sinais experimentais em nossos testes. A partir desses dados, foi desenvolvido um modelo de inteligência artificial baseado em regressão, cujo objetivo é minimizar a seguinte função de custo:

$$\mathcal{L}_m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\hat{f}(t_i, J(\omega; \boldsymbol{\xi})) - (f_m(t_i) + \delta_i) \right]^2, \quad (3.3)$$

onde as expressões analíticas das Eqs. (2.26) e (2.27) atuam como *forward maps*, guiando o processo de otimização sobre o conjunto de parâmetros $\boldsymbol{\xi}$. Aqui, $\hat{f}(t_i, J(\omega; \boldsymbol{\xi}))$ representa a predição do modelo de aprendizado de máquina para um dado conjunto parametrizado de densidades espectrais. Os valores ótimos de $\boldsymbol{\xi}$ correspondem à melhor reconstrução possível da função de densidade espectral subjacente $J(\omega)$.

Para o treinamento dos modelos de aprendizagem de máquina, foram gerados dados simulados cobrindo uma ampla gama de regimes físicos. Cada conjunto de dados contém 10^4 amostras uniformemente distribuídas dentro de intervalos pré-definidos para os parâmetros que caracterizam as funções de densidade espectral dos modelos PD e AD: trabalhando com unidades naturais para ambos os modelos ($\omega_0 = 1$), no caso do modelo PD, os parâmetros variam como $\alpha \in [0,1; 1,0]$, $s \in [0,1; 3,0]$ e $\omega_c \in [0,1; 3,0]$, enquanto para o modelo AD os intervalos adotados foram $\lambda \in [0,1; 4,0]$, $\gamma_0 \in [0,1; 4,0]$ e $\omega_b \in [0,9; 1,1]$.

A escolha desse intervalo estreito para ω_b deve-se à condição de quase-ressonância exigida para que a dinâmica quântica seja fisicamente relevante. Em termos físicos, a densidade espectral que define o acoplamento entre o sistema e o banho bosônico apresenta um pico em torno de uma frequência característica ω_b . Para que o amortecimento e as oscilações de coerência sejam observáveis, esse pico deve estar próximo à diferença de energia do sistema de dois níveis, ω_0 . Caso contrário, o acoplamento torna-se fora de ressonância e a resposta dinâmica se torna muito fraca ou pouco informativa, dificultando a inferência precisa dos parâmetros espectrais. Assim, o intervalo restrito em torno de ω_0 garante a geração de amostras fisicamente mais significativas, nas quais a reconstrução de $J(\omega)$ é bem definida e sensível aos efeitos do acoplamento sistema-banho.

3.2 Treinamento dos modelos

Para avaliar a robustez dos modelos de aprendizagem de máquina, os dados simulados foram divididos em dois subconjuntos: 75% das amostras foram utilizadas para o treinamento e 25% para o teste. O treinamento foi realizado separadamente para cada variável e sempre sobre dados limpos, isto é, sem a introdução de ruído, a fim de que os modelos aprendessem a estrutura física ideal dos sinais associados à função de densidade espectral $J(\omega)$.

Posteriormente, para investigar a resiliência dos modelos frente a imperfeições experimentais, foram considerados dois cenários distintos durante a fase de teste: o caso sem ruído ($\epsilon = 0$), que chamaremos de caso ideal, e o caso com ruído moderado de 5% ($\epsilon = 0,05$). Essa perturbação foi aplicada exclusivamente aos dados de teste, conforme explicado na seção 3.1, simulando condições experimentais realistas e permitindo avaliar a capacidade dos modelos treinados em dados ideais de manter um desempenho satisfatório diante de medições ruidosas.

Todos os experimentos foram realizados em Python 3.11, utilizando as bibliotecas NumPy, Pandas, Scikit-Learn, Matplotlib e XGBoost. A implementação dos algoritmos e a execução dos experimentos foram realizadas na plataforma de nuvem Google Colaboratory. O ambiente de execução foi configurado com uma arquitetura heterogênea para otimizar o desempenho de diferentes bibliotecas:

1. Processamento Central (CPU): Foi alocado um processador Intel Xeon (frequência de

2,30 GHz), com 2 núcleos virtuais (vCPUs) e aproximadamente 13 GB de memória RAM. Este recurso foi utilizado para o pré-processamento dos dados e para o treinamento do modelo Random Forest (via biblioteca Scikit-Learn), empregando processamento paralelo ($n_{jobs} = -1$) para distribuir a carga entre os núcleos disponíveis.

2. Acelerador Gráfico (GPU): Para o modelo XGBoost, utilizou-se uma GPU NVIDIA Tesla T4 (com 16 GB de VRAM GDDR6). O uso da GPU foi empregado para acelerar o cálculo dos gradientes via CUDA.

Para o modelo de Pure Dephasing, os hiperparâmetros do *Random Forest* foram estabelecidos da seguinte forma: número de árvores de decisão `n_estimators = 200`, profundidade máxima não restringida (`max_depth = None`) permitindo o crescimento total das árvores, número mínimo de amostras para divisão de um nó `min_samples_split = 2`, número mínimo de amostras por folha `min_samples_leaf = 1` e seleção de atributos por divisão baseada na raiz quadrada do total de *features* (`max_features = 'sqrt'`). A reprodutibilidade foi assegurada fixando-se a semente pseudo-aleatória `random_state = 42`.

Já para o AD, os hiperparâmetros do *XGBoost* foram mantidos fixos para garantir reprodutibilidade entre os experimentos: profundidade máxima `max_depth = 7`, taxa de aprendizado `eta = 0.02`, proporção de amostragem `subsample = 0.8`, amostragem por colunas `colsample_bytree = 0.8`, regularização `reg_lambda = 1.0`, semente pseudo-aleatória `seed = 42` e número máximo de iterações `num_boost_round = 4000`, sempre com *early stopping* de 100 iterações para mitigar sobreajuste. O treinamento foi conduzido com aceleração por GPU, utilizando os parâmetros nativos da biblioteca.

4 Resultados e discussões

Nesta seção, apresentamos os resultados obtidos para os canais de *Pure Dephasing* (PD) e *Amplitude Damping* (AD) utilizando os modelos de *Random Forest* (RF) e *Extreme Gradient Boosting* (XGB), respectivamente. O objetivo foi avaliar a capacidade dos modelos em reconstruir os parâmetros da densidade espectral $J(\omega)$ a partir dos sinais simulados. Foram considerados diferentes números de medições experimentais, variando de 2 a 10 pontos para o PD e entre 5 e 200 pontos para o AD, uniformemente espaçados no intervalo temporal definido para as observáveis (de $0,1/\omega_0$ a $10/\omega_0$), a fim de investigar o impacto da quantidade de dados na acurácia dos modelos.

4.1 Resultados para o canal de *Pure Dephasing* com RF

A Tabela ?? e a Figura 1 apresentam a comparação dos erros percentuais absolutos médios (MAPE) obtidos para os parâmetros α , s e ω_c em dois cenários: ideal e ruidoso ($\epsilon = 0,05$), no contexto do modelo de *Pure Dephasing*. Apesar da função de custo ser definida pelo erro quadrático médio (MSE), o MAPE facilita a visualização da performance dos modelos. O treinamento do modelo levou aproximadamente 75 segundos, evidenciando a alta performance do RF.

Tabela 1 – Comparação do MAPE (%) para os cenários Ideal ($\epsilon = 0$) e Ruidoso ($\epsilon = 0,05$) em função do número de pontos (N) para o Pure Dephasing.

Fonte: Elaboração própria.

N	MAPE - Ideal			MAPE - Ruidoso		
	α	s	ω_c	α	s	ω_c
2	41.97	29.65	61.19	44.33	31.02	61.19
3	21.07	19.51	28.90	23.21	21.02	30.71
4	13.95	15.74	20.61	16.44	17.71	23.90
5	12.99	16.66	20.98	15.12	19.07	24.00
6	12.85	17.30	22.39	15.10	20.05	25.02
7	13.48	18.50	24.25	15.15	20.36	26.59
8	13.90	18.91	26.30	15.39	21.01	28.70
9	13.86	18.80	25.75	15.33	21.14	28.73
10	14.28	19.44	27.07	15.46	21.39	28.80

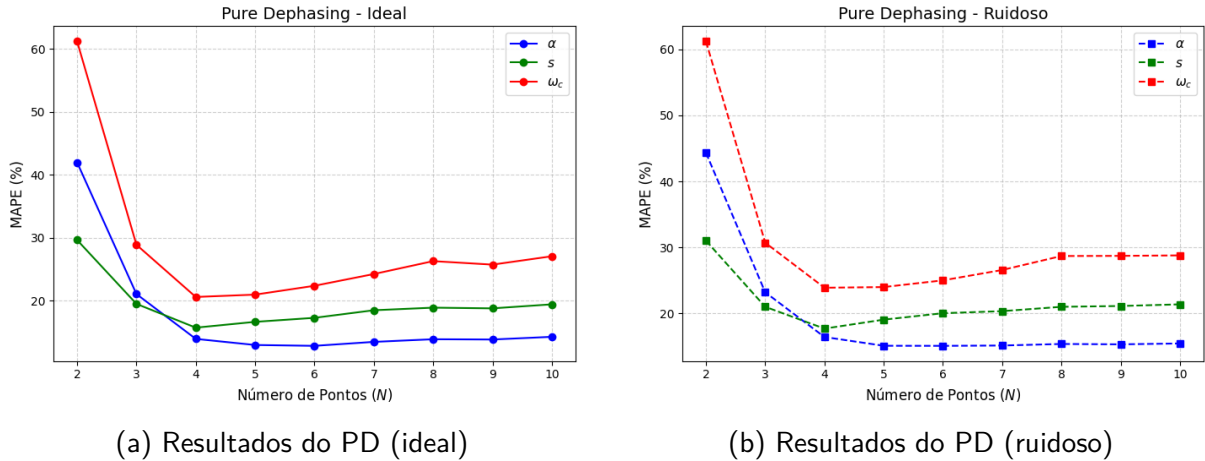


Figura 1 – Comparação do MAPE (%) para os cenários Ideal ($\epsilon = 0$) e Ruidoso ($\epsilon = 0,05$) em função do número de pontos (N) para o Pure Dephasing.

Fonte: Elaboração própria.

Observa-se que, em geral, os erros no cenário ideal apresentam melhor performance com N por volta de 5, evidenciando que a maior parte da física do problema está no início da curva. Em outras palavras, aumentar muito o número de medições acaba por aumentar o número de dados na região assintótica da curva, o que dificulta a predição do modelo. Isso justifica a escolha de um intervalo menor para N e indica uma boa capacidade do método em reconstruir os parâmetros com boa acurácia mesmo em condições limitadas de dados. No cenário ruidoso, há um aumento esperado no erro, principalmente para s e ω_c , refletindo a maior sensibilidade desses parâmetros à presença de ruído. Para fins de caracterização experimental rápida, erros nesta faixa são aceitáveis, pois permitem identificar o regime operacional do ruído ambiental e guiar estratégias de desacoplamento dinâmico sem o custo temporal de uma tomografia de processo completa.

Apesar disso, a degradação do desempenho não é drástica, e o método mantém resultados consistentes mesmo com ruído moderado, o que demonstra sua robustez. O modelo de *Pure Dephasing* exige um número relativamente reduzido de medições para atingir desempenho estável e funcional, o que é uma característica vantajosa em aplicações experimentais, onde o custo de coleta de dados pode ser significativo. Em suma, os resultados evidenciam que o método é eficiente, robusto ao ruído e capaz de operar com poucas medidas sem perda relevante de acurácia.

4.2 Resultados para o canal *Amplitude Damping* com XGB

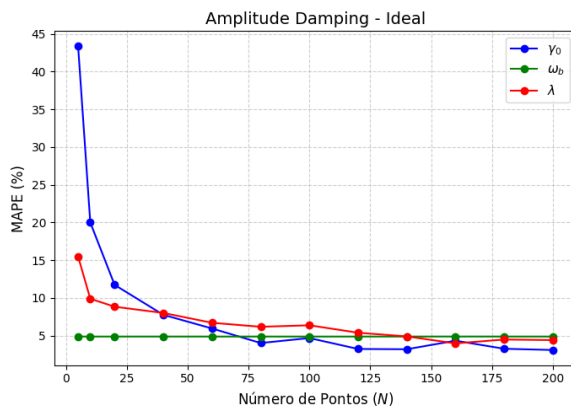
A Tabela 2 e a figura 2 apresentam os erros percentuais absolutos médios (MAPE) dos parâmetros γ_0 , λ e ω_b nos cenários ideal e ruidoso ($\epsilon = 0,05$) para o modelo de *Amplitude Damping*. O treinamento do modelo potencializado por GPU levou aproximadamente 200

segundos, evidenciando a baixa complexidade computacional da abordagem e a velocidade do XGB.

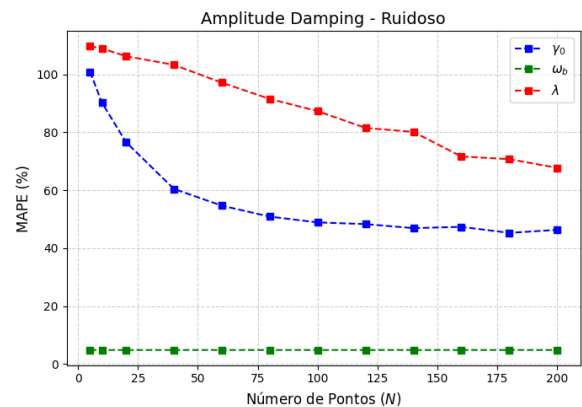
Tabela 2 – Comparação do MAPE (%) para os cenários Ideal ($\epsilon = 0$) e Ruidoso ($\epsilon = 0,05$) em função do número de pontos (N) para o Amplitude Damping.

Fonte: Elaboração própria.

N	MAPE - Ideal			MAPE - Ruidoso		
	γ_0	λ	ω_b	γ_0	λ	ω_b
5	43.35	15.49	4.88	100.92	109.71	4.88
10	20.00	9.89	4.88	90.22	108.95	4.88
20	11.72	8.83	4.88	76.64	106.29	4.88
40	7.76	8.00	4.88	60.50	103.30	4.88
60	5.95	6.70	4.88	54.69	97.15	4.88
80	4.02	6.17	4.88	50.92	91.55	4.88
100	4.68	6.37	4.88	48.92	87.31	4.88
120	3.23	5.38	4.88	48.33	81.53	4.88
140	3.19	4.90	4.88	46.94	80.13	4.88
160	4.33	3.97	4.88	47.38	71.66	4.88
180	3.26	4.48	4.88	45.30	70.74	4.88
200	3.09	4.41	4.88	46.35	67.75	4.88



(a) Resultados do AD (ideal)



(b) Resultados do AD (ruidoso)

Figura 2 – Comparação do MAPE (%) para os cenários Ideal ($\epsilon = 0$) e Ruidoso ($\epsilon = 0,05$) em função do número de pontos (N) para o Amplitude Damping.

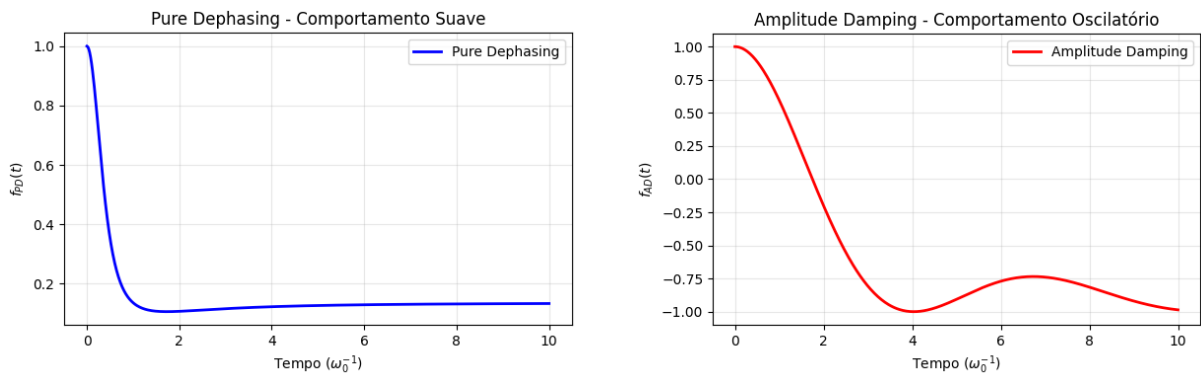
Fonte: Elaboração própria.

Nas Figuras 2a e 2b, nota-se que, no cenário ideal, os erros de γ_0 e λ diminuem com N , enquanto ω_b mantém-se praticamente constante. Esse comportamento era esperado, uma vez que ω_b representa a frequência central do banho bosônico, escolhida próxima da frequência natural do sistema ($\omega_b \approx \omega_0$). Nesse regime quase ressonante, pequenas variações em ω_b produzem efeitos pouco perceptíveis na dinâmica observável, o que reduz a sensibilidade do modelo a esse parâmetro.

Esses resultados contrastam com a rápida convergência no MSE observada para o PD, em que o método mostrou alta eficácia mesmo para um baixo número de medições. Isso indica uma maior complexidade da dinâmica dissipativa, que envolve simultaneamente perda de energia e decoerência.

Já sob ruído, o modelo não consegue reduzir significativamente os erros de γ_0 e λ , embora a previsão de ω_b se mantenha estável. Isso indica que o canal de *Amplitude Damping* é mais sensível ao ruído experimental e exige mais dados para atingir previsões estáveis.

Analisando as funções (2.13) e (2.22), é possível notar que o sinal utilizado para o *Amplitude Damping* no modelo Lorentziano contém funções hiperbólicas e termos imaginários que geram um comportamento oscilatório quando $d \in \mathbb{C}$ (característica não-Markoviana associada à ocorrência de *revivals*, isto é, reaparecimentos temporários de população ou coerência devido ao retorno de informação do ambiente para o sistema), conforme observável na Figura 3 (STRATHEARN; LOVETT; KIRTON, 2017). Nessa condição, a dinâmica torna-se mais complexa e os modelos de aprendizagem de máquina precisam aprender a partir de uma família muito mais diversa de curvas, em que os parâmetros são de muito mais difícil separação em comparação com o PD, principalmente devido ao fato de γ_0 e λ estarem acoplados no termo d , o que implica que diferentes combinações de parâmetros podem gerar sinais muito semelhantes.



(a) Plot de $f_{PD}(t)$ não-Markoviano

(b) Plot de $f_{AD}(t)$ não-Markoviano

Figura 3 – Comparação de curvas de $f(t)$ para (a) *Pure Dephasing* ($\xi = [1,0; 3,0; 1,0]$) e (b) *Amplitude Damping* ($\xi = [0,8; 0,3; 1,0]$) em regimes não-Markovianos.

Fonte: Elaboração própria.

No modelo Lorentziano, a não-Markovianidade acontece quando a taxa de decaimento torna-se negativa, o que ocorre (pela definição de d) com o aumento da razão γ_0/λ . De fato, ao plotarmos uma comparação (Figura 4) entre as previsões do modelo e os valores reais para essa razão no cenário ruidoso, é evidente que seu aumento (ou seja, o aumento da não-Markovianidade) causa uma dispersão cada vez maior, apontando que de fato as dinâmicas não-Markovianas no AD são responsáveis por grande parte do erro observado. Os picos e *revivals* em f_{AD} também são informações muito relevantes para a reconstrução dos parâmetros, o que torna o sinal como um todo mais sensível ao ruído gaussiano. A reconstrução dos

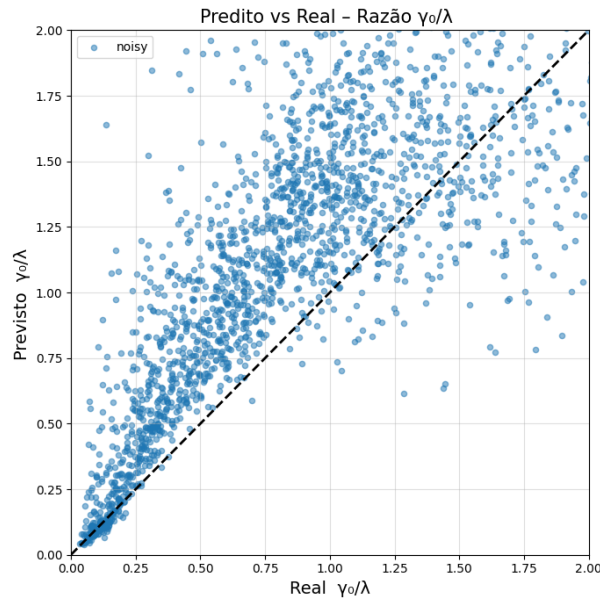


Figura 4 – Previsões do modelo de Aprendizagem de Máquina para a razão γ_0/λ para $N = 200$.
Fonte: Elaboração própria.

parâmetros a partir de dados ruidosos é, portanto, uma tarefa mais estável no PD, que tende a apresentar um comportamento mais suave mesmo em regimes não-Markovianos.

Vale notar que, de forma independente e simultânea ao desenvolvimento deste projeto, foi publicado um estudo metodologicamente semelhante (BARR et al., 2025). Embora não houvesse conhecimento prévio entre as partes, ambos os trabalhos convergem para ideias bastante próximas, indicando que a aplicação de modelos de aprendizado de máquina para extração de parâmetros da densidade espectral em sistemas quânticos abertos emerge como uma direção natural e promissora para a área.

Em suma, o método mostra-se altamente eficaz principalmente para o PD, podendo obter uma acurácia experimentalmente razoável mesmo com um número reduzido de medidas e sendo resiliente a ruído. Para o AD, nota-se também uma ótima performance, mas com necessidade de um número maior de medições mesmo no caso ideal e uma maior sensibilidade ao ruído experimental, principalmente em regimes não-Markovianos.

5 Conclusão

De modo geral, os resultados obtidos evidenciam que o método proposto é capaz de reconstruir com boa acurácia os parâmetros do modelo, apresentando um desempenho notavelmente robusto no caso do *Pure Dephasing*, que requer poucas medidas para alcançar erros razoáveis e consistentes. No caso do *Amplitude Damping*, observa-se que o método também apresenta excelente desempenho no cenário ideal, com erros significativamente reduzidos à medida que o número de medidas aumenta. Contudo, a presença de ruído impacta de forma mais perceptível esse tipo de dinâmica.

Esses resultados reforçam o potencial da abordagem de aprendizagem de máquina como uma ferramenta promissora para caracterização de canais quânticos e estudo de processos de decoerência em contextos experimentais, oferecendo uma metodologia eficiente para reconstrução de parâmetros a partir de conjuntos de dados reduzidos.

Referências

BARR, J.; MUKHERJEE, S.; FERRARO, A.; PATERNOSTRO, M.; ZICARI, G. *A machine learning based approach to the identification of spectral densities in quantum open systems*. 2025. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2507.13730>>.

BAUMGRATZ, T.; CRAMER, M.; PLENIO, M. B. Quantifying coherence. *Physical Review Letters*, v. 113, p. 140401, 2014. ISSN 10797114.

BREUER, H. P.; PETRUCCIONE, F. *The Theory of Open Quantum Systems*. [S.l.]: Oxford University Press, USA, 2007. 636 p.

CHEN, T.; GUESTRIN, C. Xgboost: A scalable tree boosting system. In: *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. ACM, 2016. (KDD '16), p. 785–794. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1145/2939672.2939785>>.

COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. *Quantum Mechanics, Vol 1*. 1st. ed. [S.l.]: Wiley, 1991. 914 p.

DINANI, H. T.; TANCARA, D.; FANCHINI, F. F.; NORAMBUENA, A.; COTO, R. *Estimating the degree of non-Markovianity using variational quantum circuits*. 2022.

FANCHINI, F. F.; KARPAT, G.; ROSSATTO, D. Z.; NORAMBUENA, A.; COTO, R. Estimating the degree of non-Markovianity using machine learning. *Physical Review A*, v. 103, n. 2, p. 022425, 2 2021. ISSN 2469-9926. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.103.022425>>.

GOODFELLOW, I.; BENGIO, Y.; COURVILLE, A. *Deep Learning*. Cambridge, Massachusetts: The MIT Press, 2016.

HAIKKA, P.; JOHNSON, T. H.; MANISCALCO, S. Non-markovianity of local dephasing channels and time-invariant discord. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 87, p. 010103, Jan 2013. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.87.010103>>.

HO, T. K. Random decision forests. In: *Proceedings of 3rd International Conference on Document Analysis and Recognition*. [S.l.: s.n.], 1995. v. 1, p. 278–282 vol.1.

LINDBLAD, G. On the Generators of Quantum Dynamical Semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, v. 48, p. 119–130, 1976. Disponível em: <<http://link.springer.com/article/10.1007/BF01608499>>.

NORAMBUENA, A.; MAZE, J. R.; RABL, P.; COTO, R. Quantifying phonon-induced non-markovianity in color centers in diamond. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 101, n. 2, fev. 2020. ISSN 2469-9934. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.101.022110>>.

SCHLOSSHAUER, M. Quantum decoherence. *Physics Reports*, Elsevier BV, v. 831, p. 1–57, out. 2019. ISSN 0370-1573. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2019.10.001>>.

STRATHEARN, A.; LOVETT, B. W.; KIRTON, P. Efficient real-time path integrals for non-markovian spin-boson models. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 19, n. 9, p. 093009, set. 2017. ISSN 1367-2630. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/aa8744>>.

WEISS, U. *Quantum Dissipative Dynamics*. 1999. 448 p.

ŁUCZKA, J. Spin in contact with thermostat: Exact reduced dynamics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 167, n. 3, p. 919–934, 1990. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0378437190902998>>.