

CONTROLE DE SISTEMAS QUÂNTICOS

LÚCIO FASSARELLA*

**Departamento de Matemática Aplicada - CEUNES/UFES*
Rodovia BR 101 Norte, Km. 60, Bairro Litorâneo, CEP 29932-540
São Mateus, ES, Brasil

Email: lucio.fassarella@ufes.br

Abstract— Formulation of the Pontryagin Maximum Principle to solve problems of optimal control of the Mayer type in Markovian quantum systems, with a review of relevant topics.

Keywords— Quantum Control, Markovian Quantum Systems, Pontryagin Maximum Principle

Resumo— Formulação do Princípio do Máximo de Pontryagin para resolver problemas de controle ótimo do tipo Mayer em sistemas quânticos Markovianos, com revisão dos tópicos pertinentes.

Keywords— Controle Quântico, Sistemas Quânticos Markovianos, Princípio do Máximo de Pontryagin

1 Introdução

O controle de sistemas quânticos (ou controle quântico) consiste na manipulação desses sistemas visando determinar ou delimitar deliberadamente seu comportamento. Tipicamente, controlar um sistema significa conduzir o sistema para um estado final prestabelecido ou constranger sua evolução temporal a fim de preservar, maximizar ou minimizar alguma quantidade.

A teoria do controle quântico é uma área da física em franco desenvolvimento, embora venha sendo sistematicamente estudada desde a década de 1970 (Butkovskii, 1979) (Huang, 1983) (Belavkin, 1983) (Dahleh, 1987). As perspectivas atuais de avanços são amplas, tanto no aspecto teórico quanto nas técnicas experimentais e potenciais aplicações tecnológicas, principalmente relacionadas ao processamento de informação quântica (Bennett, 1995) (Ramakrishna, 1996):

“The development of general principles of quantum control theory is an essential task for a future quantum technology.” (Dowling, 2003).

“The potential advantage offered by *quantum information processing* has given to quantum control a new perspective, and a new set of tasks: the ability of employing quantum systems to store, manipulate and retrieve information requires an unprecedented degree of control, and further motivates the development of control schemes specifically tailored to the quantum mechanical setting.” (Altafini, 2007).

“The integration of quantum physics and engineering methodologies has become one of the most interesting and potentially transformative programs relating to emergent technologies.” “To some ex-

tent this an ongoing program [on quantum control] is still speculative as the current state of physical quantum control is strikingly dissimilar to its classical counterpart: one major anomaly is the fact that modern classical control deals almost exclusively with feedback system, whereas this features in only a relatively small fraction of theoretical work on quantum control, and even rarer in experiment. However, we would argue that this is only a temporary situation, and that the future development of the field will see the powerful insights of classical control theory emerging again in the quantum setting.” (Belavkin, 2013).

Neste artigo, consideramos o problema de controle ótimo do tipo Mayer em *sistemas quânticos Markovianos*. Esse tipo de sistema serve para modelar a memória de um computador quântico realístico, cuja interação com o ambiente reduz a fidelidade do registro e da transmissão de informação devido a processos tais como *impurificação* e *descoerência*. Nesse caso, é natural tentar controlar o sistema visando suprimir ou reduzir os efeitos deletérios de tais processos.

O problema se enquadra na categoria dos *problemas de controle ótimo de sistemas quânticos*. Para resolver tais problemas, apresentamos uma formulação adequada do *Princípio do Máximo de Pontryagin*, obtida naturalmente da formulação clássica a partir da escolha de uma base de operadores conveniente para descrever os estados e a dinâmica do sistema quântico.

O artigo tem a seguinte estrutura: na *Seção 2* apresentamos descrição dos sistemas quânticos Markovianos; na *Seção 3* formulamos o problema de controle ótimo e enunciamos o Princípio do Máximo de Pontryagin, dando um esboço da sua demonstração; a *Seção 4* finaliza a discussão regis-

trando algumas observações pertinentes. Devido a limitação no tamanho desta comunicação, não abordamos exemplos.

2 Sistemas Quânticos Markovianos

Descrevemos um sistema quântico \mathcal{Q} em termos de *observáveis* e *estados* concretamente realizados num espaço de Hilbert \mathcal{H} (Araki, 1999, Chapter 1), o qual vamos supor ter dimensão finita $N = \dim \mathcal{H}$.

► A família de observáveis \mathcal{A} é constituída pelos operadores auto-adjuntos em \mathcal{H} – denotados aqui por letras latinas maiúsculas (A, B, \dots);

► A família de estados \mathcal{S} é constituída pelos operadores-estatísticos em \mathcal{H} , i.e., operadores auto-adjuntos traciais com traço unitário – denotados aqui por letras gregas minúsculas (ρ, σ, \dots);

► O valor esperado de um observável A quando o sistema está num estado ρ é dado pelo traço $Tr(\rho A)$;

► A evolução temporal do sistema é descrita (na *representação de Schrödinger*) por uma família de aplicações, chamadas de *operadores de evolução*:¹

$$t_0 \leq t_1 \leq t_2 \rightsquigarrow \mathcal{U}(t_2, t_1) : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}$$

Assim, se no instante $t_1 \geq 0$ o estado do sistema for ρ_1 , então no instante $t_2 > t_1$ o estado do sistema será $\rho_2 = \mathcal{U}(t_2, t_1) \rho_1$. Para cada $\rho_1 \in \mathcal{S}$, definimos o estado dependente do tempo com condição inicial ρ_1 em $t_1 \geq 0$ por

$$\rho(\tau) := \mathcal{U}(t_1 + \tau, t_1) \rho_0$$

Naturalmente, os operadores de evolução devem satisfazer a seguinte condição algébrica:

$$\mathcal{U}(t_3, t_2) \mathcal{U}(t_2, t_1) = \mathcal{U}(t_3, t_1) \quad , \quad \forall t_0 \leq t_1 \leq t_2 \leq t_3$$

► Dizemos que a evolução temporal do sistema é Markoviana quando os operadores de evolução dependem apenas do intervalo entre os instantes inicial e final, i.e., $\mathcal{U}(t + \tau, t)$ depende apenas de $\tau > 0$ e não de $t \geq t_0$; nesse caso, definimos o *semigrupo dinâmico quântico*:

$$0 \leq \tau \rightsquigarrow \mathcal{U}(\tau) := \mathcal{U}(t_0 + \tau, t_0)$$

o qual possui a seguinte propriedade

$$\mathcal{U}(\tau_2) \mathcal{U}(\tau_1) = \mathcal{U}(\tau_2 + \tau_1) \quad , \quad \tau_1, \tau_2 \geq 0$$

► Tecnicamente, exigimos que os operadores de evolução se estendam a operadores lineares sobre o espaço $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ dos operadores lineares em \mathcal{H} . Nesse caso, sob certas hipóteses de regularidade,

¹Aqui, t_0 designa o instante a partir do qual o sistema evolui após ter sido preparado, considerando todas as suas interações.

o semigrupo quântico possui um gerador infinitesimal L chamado *superoperador*² *Liouvillian*,

$$\mathcal{U}(\tau) = \exp(\tau L) \quad , \quad \tau \geq 0$$

e os estados dependentes do tempo satisfazem a equação mestre quântica (*quantum Markovian master equation*) (Alicki, 2007, p.7) (Breuer, 2003, p.119),

$$\frac{d}{d\tau} \rho(\tau) = L\rho(\tau) \quad (1)$$

► Podemos exprimir o Liouvillian em termos de uma base conveniente de operadores de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ – a qual será útil na formulação do Princípio do Máximo de Pontryagin. Com efeito, considere uma família de operadores $\{\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{N^2-1}\} \subset \mathcal{L}(\mathcal{H})$ com as seguintes características (Bertlmann, 2008):³

$$\begin{cases} \sigma_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} I \\ Tr\{\sigma_i^* \sigma_j\} = \delta_{ij} \quad \forall i, j = 0, 1, \dots, N^2 - 1 \end{cases} \quad (2)$$

Então, existem um operador auto-adjunto H em \mathcal{H} e uma matriz hermitiana positiva $(a_{ij})_{i,j=1}^{N^2-1}$ tais que (Breuer, 2003, pp.119-121)

$$\begin{aligned} L\rho = & -i[H, \rho] + \\ & + \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} \left\{ \sigma_i \rho \sigma_j^* - \frac{1}{2} (\sigma_j^* \sigma_i \rho + \rho \sigma_j^* \sigma_i) \right\} \end{aligned} \quad (3)$$

Nesse caso, H é denominado Hamiltoniano do sistema e definimos o *superoperador dissipador* (Breuer, 2003, pp.123) por

$$\mathcal{D}(\rho) := \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} \left\{ \sigma_i \rho \sigma_j^* - \frac{1}{2} (\sigma_j^* \sigma_i \rho + \rho \sigma_j^* \sigma_i) \right\} \quad (4)$$

Assim,

$$L\rho = -i[H, \rho] + \mathcal{D}(\rho) \quad (5)$$

Recorrendo ao *Teorema de Stone*, podemos deduzir que: *o operador dissipador é nulo se, e somente se, a evolução temporal do sistema é unitária,*

$$\mathcal{D} \equiv 0 \iff \mathcal{U}(\tau) \rho = e^{-iH\tau} \rho e^{iH\tau} \quad \forall \rho \in \mathcal{S}$$

Assim, concluímos que H descreve a *dinâmica do sistema fechado* (aquela que o sistema tem caso esteja isolado ou sob ação exclusiva de campos clássicos, sem interagir com outros sistemas quânticos), enquanto o superoperador dissipador \mathcal{D} descreve a interação do sistema com demais elementos do seu ambiente (incorporando todos os processos dissipativos).

²O termo superoperador é aplicado para destacar o fato de que L é um operador linear definido num espaço de operadores lineares.

³ I denota o operador identidade e as condições impostas a base de operadores implicam que $Tr\{\sigma_j\} = 0, \forall j = 1, \dots, N^2 - 1$.

3 Controle Quântico Ótimo

O controle em malha aberta de um sistema quântico é definido pela ação de potenciais clássicos que modificam a dinâmica, equação (1). Como a ação de potenciais clássicos é descrita por operadores auto-adjuntos, vamos considerar o caso em que o Liouvilliano do sistema quântico controlado é dependente do tempo e tem a seguinte forma

$$L_t \rho = -i[H, \rho] + \mathcal{D}(\rho) - i[K(t), \rho] \quad (6)$$

onde $K(t)$ denota uma família uniparamétrica de operadores auto-adjuntos. Para simplificar a descrição do controle, vamos usar uma base $\{\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{N^2-1}\}$ de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ cujos operadores satisfazem as condições (2) e são também auto-adjuntos (Bertlmann, 2008), i.e.,

$$\sigma_j^* = \sigma_j, \quad \forall j = 0, 1, \dots, N^2 - 1 \quad (7)$$

Assim, podemos exprimir o potencial de controle em termos de funções reais dependentes do tempo $u_1(t), \dots, u_{N^2-1}(t)$, chamadas aqui *funções de controle*:

$$K(t) = \sum_{j=1}^{N^2-1} u_j(t) \sigma_j \quad (8)$$

Usualmente, temos que assumir restrições no potencial de controle $K(t)$. Isso equivale a restrições nas funções de controle e aqui vamos considerar que o conjunto ordenado das funções de controle assume valores num *espaço de controle* $\mathbb{U} \subseteq \mathbb{R}^{N^2-1}$:

$$u(t) := (u_1(t), \dots, u_{N^2-1}(t)) \in \mathbb{U}, \quad \forall t \geq 0 \quad (9)$$

Com tais considerações, a dinâmica do sistema quântico Markoviano controlado é definida por uma equação diferencial ordinária de primeira ordem (1) com Liouvilliano dependente implicitamente do tempo:

$$\begin{aligned} L_t \rho &= L(\rho; u(t)) \\ &= -i[H, \rho] - i \sum_{j=1}^{N^2-1} u_j(t) [\sigma_j, \rho] + \\ &+ \sum_{i,j=1}^{N^2-1} a_{ij} \left\{ \sigma_i \rho \sigma_j^* - \frac{1}{2} (\sigma_j^* \sigma_i \rho + \rho \sigma_j^* \sigma_i) \right\} \end{aligned} \quad (10)$$

Fixados uma função de controle $u(t)$ e um estado inicial $\rho_0 \in \mathcal{S}$, denotamos por $\rho_u(t)$ a solução da equação dinâmica do sistema controlado com condição inicial ρ_0 ,

$$\left\{ \frac{d}{dt} \rho_u(t) = L \rho_u(t) \quad , \quad \rho_u(0) = \rho_0 \right. \quad (11)$$

Agora, sejam $\phi : \mathcal{S} \times \mathbb{U} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ e $F : \mathcal{S} \times \mathbb{U} \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ funções contínuas limitadas inferiormente, descrevendo quantidades de interesse. Dados $\tau > 0$ e $\gamma > 0$, considere o *funcional custo* definido sobre as funções de controle

$$u(t) = (u_1(t), \dots, u_{N^2-1}(t)):$$

$$\begin{aligned} J\{u(t)\} &:= \phi(\rho_u(\tau), u(\tau), \tau) + \\ &+ \gamma \int_0^\tau F(\rho_u(t), u(t), t) dt \end{aligned} \quad (12)$$

Finalmente, definimos (seguindo (D'Alessandro, 2008, p.158)):

- O problema de controle ótimo em malha aberta do sistema quântico Markoviano consiste em, para dado estado inicial $\rho_0 \in \mathcal{S}$, determinar o conjunto das funções de controle $\tilde{u}(t) = (\tilde{u}_1(t), \dots, \tilde{u}_{N^2-1}(t)) : [0, \tau] \rightarrow \mathbb{U}$ que minimiza o funcional custo J , i.e.,

$$J\{\tilde{u}(t)\} \leq J\{u(t)\}, \quad \forall u(t) \in \mathbb{U} \quad (13)$$

Com adaptações naturais, também podemos definir o problema de *maximização*.

Classificamos os problemas de controle ótimo em três tipos, dependendo da forma do funcional J :

- Problema de Mayer: $F \equiv 0$;
- Problema de Lagrange: $\phi \equiv 0$;
- Problema de Bolza: $\phi \neq 0$ e $F \neq 0$.

No problema de Mayer, o controle visa conduzir o sistema do estado inicial ρ_0 aos estados que minimizam o funcional ϕ no conjunto dos estados que podem ser alcançados no tempo de evolução τ . No problema de Lagrange, o controle visa obter o estado que minimiza a quantidade física definida pela integral de caminho do funcional F . O problema de Bolza combina ponderadamente os objetivos de atingir um estado final e otimizar alguma quantidade (e.g., quando se pretende conduzir um sistema quântico ao seu estado fundamental dispendendo no processo a menor energia possível); nesse caso, a solução do problema de Bolza geralmente não coincide com a solução dos problemas de Mayer e Lagrange correlatos, senão estabelece um “compromisso” entre ambas, dependente do parâmetro γ : diminuir γ significa priorizar a minimização do funcional ϕ em detrimento do funcional definido por F . (Não obstante essas diferenças, os problemas dos tipos Mayer, Lagrange e Bolza são equivalentes no sentido de que qualquer um pode ser reformulado nos termos de qualquer dos outros dois (D'Alessandro, 2008, pp.159-160).)

Sumariando, a equação dinâmica (11) determina como o sistema evolui sob ação do controle, enquanto o funcional custo (12) especifica o objetivo do controle.

3.1 Princípio do Máximo de Pontryagin

O Princípio do Máximo de Pontryagin (PMP) transforma um problema de otimização em dimensão infinita (a dimensão do espaço de funções de

controle) num problema de otimização em dimensão finita (a dimensão do espaço dos parâmetros de controle \mathcal{U}).

Nos restringimos a enunciar o princípio na forma de teorema no caso do problema de Mayer com estado final livre e apresentamos uma demonstração omitindo detalhes técnicos. A essência da demonstração é uma idéia análoga a usada na dedução das equações de Euler-Lagrange a partir do Princípio de Hamilton: *consideramos variações locais em torno de um suposto ponto de mínimo \tilde{u} do funcional J e deduzimos as propriedades de \tilde{u} que seguem da condição de que ele é mínimo local desse funcional*. Essa demonstração tem como “truque” a introdução do coestado.

Preliminares notacionais

Introduzimos uma notação conveniente para enunciar o teorema e explicitar o significado das derivadas e operações que nele ocorrem.

Começamos identificando os operadores em \mathcal{H} com suas coordenadas na base de operadores auto-adjuntos $\{\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{N^2-1}\}$ de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$:

$$\rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightsquigarrow \rho = \rho(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = \sum_{j=0}^N \zeta_j \sigma_j$$

Assim, para uma aplicação $L = (L_j)_{j=0}^{N^2-1} : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \times \mathbb{U} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$, um funcional $\phi : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{R}$, operadores $\rho, \rho' \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ e pontos $u, u' \in \mathbb{U}$, definimos:

$$\begin{aligned} \rho \cdot \rho' &:= \sum_{j=0}^{N^2-1} \zeta_j \zeta'_j \in \mathbb{C} \\ \left(\frac{\partial L}{\partial \rho} \cdot \rho' \right)_j &:= \sum_{i=0}^{N^2-1} \frac{\partial L_j}{\partial \rho_i} \rho'_i \\ \left(\frac{\partial L}{\partial \rho}^\dagger \cdot \rho' \right)_j &:= \sum_{i=0}^{N^2-1} \frac{\partial L_i}{\partial \rho_j} \rho'_i \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \\ \left(\frac{\partial L}{\partial u} \cdot u' \right)_j &:= \sum_{k=0}^{N^2-1} \frac{\partial L_j}{\partial u_k} u'_k \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \\ \left(\frac{\partial L}{\partial u}^\dagger \cdot \rho' \right)_k &:= \sum_{j=0}^{N^2-1} \frac{\partial L_j}{\partial u_k} \rho'_j \in \mathbb{U} \\ \left(\frac{\partial \phi}{\partial \rho} \right)_j &:= \left(\frac{\partial \phi}{\partial \rho_j} \right) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \end{aligned}$$

Com essas definições, para todo $\lambda \in \mathbb{U}$ valem as seguintes identidades (utilizadas na demonstração adiante):

$$\begin{aligned} \lambda \cdot \left(\frac{\partial L}{\partial \rho} \cdot \rho' \right) &= \left(\frac{\partial L}{\partial \rho}^\dagger \cdot \lambda \right) \cdot \rho' = \sum_j \sum_i \frac{\partial L_j}{\partial \rho_i} \lambda_j \rho'_i \in \mathbb{C} \\ \lambda \cdot \left(\frac{\partial L}{\partial u} \cdot u' \right) &= \left(\frac{\partial L}{\partial u}^\dagger \cdot \lambda \right) \cdot u' = \sum_k \sum_j \frac{\partial L_j}{\partial u_k} \lambda_j u'_k \in \mathbb{C} \end{aligned}$$

Enfim, enunciamos o Princípio do Máximo de Pontryagin:

Theorem 1 (PMP) *Considere o problema de controle ótimo quântico em malha aberta (13) com $\tau > 0$ e $\rho_0 \in \mathcal{S}$ fixados e suponha que o funcional custo do tipo Mayer não depende explicitamente das funções de controle:*

$$J\{u(t)\} = \phi(\rho_u(\tau), \tau)$$

Considere que o espaço de controle $\mathbb{U} \subseteq \mathbb{R}^{N^2-1}$ é convexo e aberto, ou fechado com fronteira $\partial\mathbb{U}$ sendo uma superfície orientável continuamente diferenciável; no caso em que \mathbb{U} é fechado, denotamos o campo unitário normal a $\partial\mathbb{U}$ que aponta para fora de \mathbb{U} por $\eta : \partial\mathbb{U} \rightarrow \mathbb{R}^{N^2-1}$. Agora, suponha que $\tilde{u}(t) : [0, \tau] \rightarrow \mathbb{U}$ seja uma função de controle que minimiza J e denote por $\tilde{\rho}(t)$ o correspondente estado dependente do tempo definido pela equação dinâmica com condição inicial

$$\left\{ \frac{d}{dt} \rho(t) = L(\rho(t), u(t)) \quad , \quad \rho(0) := \rho_0 \right. \quad (14)$$

Então, existem uma função não-negativa $\alpha(t)$ e uma função diferenciável não-nula $\lambda(t)$, chamada coestado,

$$\alpha : [0, \tau] \rightarrow [0, \infty) \quad , \quad \lambda : [0, \tau] \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$$

tais que:

i) α se anula nos instantes em que o vetor de controle não pertence ao bordo do espaço de controle:

$$\tilde{u}(t) \in \mathbb{U} \setminus \partial\mathbb{U} \Rightarrow \alpha(t) = 0 \quad , \quad \forall t \in [0, \tau]$$

ii) O coestado satisfaz a seguinte equação com condição terminal em $[0, \tau]$, chamada equação adjunta:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \lambda(t) = -\frac{\partial L}{\partial \rho}(\tilde{\rho}(t), \tilde{u}(t))^\dagger \cdot \lambda(t) \\ \lambda(\tau) = -\frac{\partial \phi}{\partial \rho}(\tilde{\rho}(\tau), \tau) \end{cases} \quad (15)$$

iii) O coestado satisfaz a seguinte condição algébrica em $[0, \tau]$.⁴

$$\frac{\partial}{\partial u} L(\tilde{\rho}(t), \tilde{u}(t))^\dagger \cdot \lambda(t) = \alpha(t) \eta(\tilde{u}(t)) \quad (16)$$

Destacamos que o membro direito da equação (16) é identicamente nulo no caso em que \mathbb{U} é aberto.

Proof: Sendo $\tilde{u}(t)$ um controle ótimo e $\tilde{\rho}(t)$ o correspondente estado ótimo para J , então

$$\phi(\tilde{\rho}(\tau), \tau) \leq \phi(\rho_u(\tau), \tau) \quad , \quad \forall u(t) \in \mathbb{U} \quad (17)$$

Seja $v(t) : [0, \tau] \rightarrow \mathbb{R}^{N^2-1}$ um campo vetorial contínuo arbitrário, exceto pela condição de apontar

⁴Simplificamos a notação escrevendo $\eta(\tilde{u}(t))$ multiplicado por zero mesmo quando $\tilde{u}(t) \notin \mathbb{U}$.

para dentro de \mathbb{U} nos instantes em que $\tilde{u}(t)$ pertence a fronteira $\partial\mathbb{U}$,

$$v(t) \cdot \eta(\tilde{u}(t)) \leq 0, \quad \forall t \in [0, \tau] / \tilde{u}(t) \in \partial\mathbb{U} \quad (18)$$

Dado $\varepsilon \gtrsim 0$ (i.e., ε não-negativo e suficientemente pequeno), definimos:

$$u_\varepsilon(t) := \tilde{u}(t) + \varepsilon v(t) \in \mathbb{U}, \quad \forall t \in [0, \tau] \quad (19)$$

Para dado $\varepsilon \gtrsim 0$, seja $\rho_\varepsilon(t)$ a solução da equação dinâmica definida pelo controle $u_\varepsilon(t)$ com condição inicial ρ_0 , i.e.,

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_\varepsilon(t) &= L(\rho_\varepsilon(t), u_\varepsilon(t)), \quad \rho_\varepsilon(0) = \rho_0 \end{aligned} \right. \quad (20)$$

Para analisarmos a condição de mínimo (17), definimos a função auxiliar

$$z(t) := \left. \frac{d}{d\varepsilon} \rho_\varepsilon(t) \right|_{\varepsilon=0} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \quad (21)$$

Assim, $\tilde{\rho}(t) = \rho_0(t)$ e

$$\rho_\varepsilon(t) - \tilde{\rho}(t) \approx \varepsilon z(t) + O(\varepsilon^2)$$

Então, pela condição de mínimo (17)

$$\begin{aligned} 0 &\leq \Delta J(\varepsilon) := \phi(\rho_\varepsilon(\tau), \tau) - \phi(\tilde{\rho}(\tau), \tau) \\ &\approx \frac{\partial \phi}{\partial \rho}(\tilde{\rho}(\tau), \tau) \cdot (\rho_\varepsilon(\tau) - \tilde{\rho}(\tau)) \\ &\approx \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial \rho}(\rho^*(\tau), \tau) \cdot z(\tau) + O(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Pela arbitrariedade de $\varepsilon \gtrsim 0$, isso implica

$$\frac{\partial \phi}{\partial \rho}(\tilde{\rho}(\tau), \tau) \cdot z(\tau) \geq 0 \quad (22)$$

Para extrairmos as consequências dessa condição analisamos as propriedades da função auxiliar $z(t)$. Primeiro, deduzimos a equação diferencial que caracteriza $z(t)$ diferenciando equação dinâmica (20) em relação a ε :

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} \frac{d}{dt} \rho_\varepsilon(t) &= \frac{\partial}{\partial \rho} L(\rho_\varepsilon(t), u_\varepsilon(t)) \cdot \frac{d}{d\varepsilon} \rho_\varepsilon(t) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial u} L(\rho_\varepsilon(t), u_\varepsilon(t)) \cdot \underbrace{\frac{d}{d\varepsilon} u_\varepsilon(t)}_{v(t)} \end{aligned}$$

Comutando as derivadas no primeiro membro e avaliando posteriormente em $\varepsilon = 0$, concluímos que $z(t)$ satisfaz a seguinte equação diferencial com condição inicial $z(0) = 0$:

$$\frac{d}{dt} z(t) = \frac{\partial}{\partial \rho} L(\tilde{\rho}(t), \tilde{u}(t)) \cdot z(t) + \frac{\partial}{\partial u} L(\tilde{\rho}(t), \tilde{u}(t)) \cdot v(t) \quad (23)$$

Agora, consideramos a equação adjunta com condição final

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{dt} \lambda(t) &= -\frac{\partial}{\partial \rho} L(\tilde{\rho}(t), \tilde{u}(t))^\dagger \cdot \lambda(t) \\ \lambda(\tau) &= -\frac{\partial}{\partial \rho} \phi(\tilde{\rho}(\tau), \tau) \end{aligned} \right. \quad (24)$$

Como essa é uma equação diferencial ordinária linear com condição final, a teoria das equações diferenciais nos garante a existência e a unicidade de uma solução – a qual denotaremos por $\lambda(t)$. Como $z(0) = 0$, podemos escrever:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \phi}{\partial \rho}(\tilde{\rho}(\tau), \tau) \cdot z(\tau) = -\lambda(\tau) \cdot z(\tau) \\ &= -\int_0^\tau \frac{d}{dt} (\lambda(t) \cdot z(t)) dt \\ &= -\int_0^\tau \left(\frac{d}{dt} \lambda(t) \cdot z(t) + \lambda(t) \cdot \frac{d}{dt} z(t) \right) dt \\ &= -\int_0^\tau dt \left\{ -\left(\frac{\partial L}{\partial \rho}^\dagger \cdot \lambda(t) \right) \cdot z(t) + \right. \\ &\quad \left. + \lambda(t) \cdot \left(\frac{\partial L}{\partial \rho} \cdot z(t) \right) + \lambda(t) \cdot \left(\frac{\partial L}{\partial u} \cdot v(t) \right) \right\} \\ &= -\int_0^\tau dt' \left\{ -\lambda(t') \cdot \left(\frac{\partial L}{\partial \rho} \cdot z(t') \right) + \right. \\ &\quad \left. + \lambda(t') \cdot \left(\frac{\partial L}{\partial \rho} \cdot z(t') \right) + \lambda(t') \cdot \left(\frac{\partial L}{\partial u} \cdot v(t') \right) \right\} \\ &= -\int_0^\tau \lambda(t) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial u} L(\tilde{\rho}(t), \tilde{u}(t)) \cdot v(t) \right) dt \\ &= -\int_0^\tau \left(\frac{\partial}{\partial u} L(\rho^*(t), \tilde{u}(t))^\dagger \cdot \lambda(t) \right) \cdot v(t) dt \end{aligned}$$

Pela condição (22), segue

$$\int_0^\tau \left(\frac{\partial}{\partial u} L(\rho^*(t), \tilde{u}(t))^\dagger \cdot \lambda(t) \right) \cdot v(t) dt \leq 0$$

Como $v(t)$ é arbitrário exceto pela condição (19), podemos concluir que $\frac{\partial}{\partial u} L(\tilde{\rho}(t), \tilde{u}(t))^\dagger \cdot \lambda(t)$ deve ser nulo nos instantes em que $u(t)$ pertence ao interior de \mathbb{U} ou deve apontar para dentro de \mathbb{U} nos instantes em que $u(t)$ pertence a fronteira de \mathbb{U} :

$$\frac{\partial}{\partial u} L(\tilde{\rho}(t), \tilde{u}(t))^\dagger \cdot \lambda(t) = \alpha(t) \eta(\tilde{u}(t))$$

□

Aplicação do Princípio do Máximo de Pontryagin O seguinte algoritmo sumariza o uso do Princípio do Máximo de Pontryagin para resolver o problema de Mayer com estado final livre:

Considere a equação dinâmica com função de controle

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = L(\rho(t), u(t))$$

e a função custo do tipo Mayer

$$J(\rho, u, \tau) = \phi(\rho(\tau), \tau)$$

1. Defina o Hamiltoniano de controle ótimo:

$$h(\lambda, \rho, u) := L(\rho, u)^\dagger \cdot \lambda$$

2. Para cada par $\lambda \in \mathbb{U}$ e $\rho \in \mathcal{S}$, determine $\tilde{u} = u(\lambda, \rho) \in \mathbb{U}$ que maximiza $h(\lambda, \rho, \cdot)$:

$$h(\lambda, \rho, \tilde{u}) \geq h(\lambda, \rho, v), \quad \forall v \in \mathbb{U}$$

3. Resolva o sistema de equações diferenciais com condições de contorno

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\rho = L(\rho, \tilde{u}) \\ \frac{d}{dt}\lambda = -\frac{\partial}{\partial\rho}L(\rho, \mathbf{u}^*)^\dagger \cdot \lambda \\ \rho(0) = \rho_0, \quad \lambda(\tau) = -\frac{\partial}{\partial\rho}\phi(\rho(\tau), \tau) \end{cases}$$

4. Finalmente, compare os valores de $\phi(\rho(\tau), \tau)$ entre as solução desse sistema para obter o controle que determina o estado que minimiza o funcional J .

O *Hamiltoniano de controle ótimo* definido na primeira etapa do algoritmo (3.1) é uma função meramente auxiliar, em geral não sendo diretamente relacionado ao Hamiltoniano do sistema quântico. A segunda etapa do algoritmo consiste de um problema típico de otimização em dimensão finita, tal como se estuda em cálculo diferencial. A terceira etapa do algoritmo pode ser resolvida como um problema de valor inicial com o valor inicial $\lambda(0)$ tratado genericamente para, depois de resolvida a equação, determinar seu valor a partir da condição final $\lambda(\tau)$. Todas os estados dependentes do tempo obtidos pelo algoritmo satisfazem as condições do *Teorema 1*, mas não há garantias de que exista alguma solução ou que alguma das soluções seja realmente a função de controle ótima do funcional J .

4 Conclusão

Dentre as possíveis aplicações do controle quântico ótimo aqui descrito, constam a redução da dissipação de energia, a redução da perda de correlações (clássicas e quânticas), e a redução da perda de informação registrada ou transmitida por um sistema quântico devido a processos dissipativos. Efetivamente, para alcançarmos esse último objetivo deveríamos controlar o sistema de modo a minimizar a taxa de aumento da *entropia de von Neumann do sistema*, a qual mede a *incapacidade de um estado quântico codificar informação* (Schumacher, 1995):

$$S(\rho) := \text{Tr}(\rho \ln \rho) \quad , \quad \forall \rho \in \mathcal{S} \quad (25)$$

Especificamente para esse problema, nossa estratégia de controle não deve ser eficiente se não for combinada com outras técnicas (tais como o uso de códigos corretores de erros).

Finalmente, embora a teoria pareça funcionar (dentro de suas limitações), o sistema de equações implicado pelo Princípio do Máximo de Pontriagin é geralmente bastante complexo, de modo que não esperamos encontrar soluções analíticas exceto em casos excepcionais.

Enfim, cabe desenvolver alguns exemplos e testar a aplicabilidade de nossa abordagem em situações concretas. Tais investigações estão em curso.

References

- Alicki, R., L. K. (2007). *Quantum Dynamical Semigroups and Applications (Lecture Notes on Physics)*, Springer.
- Altafini, C., T. F. (2007). Modeling and control of quantum systems: An introduction, *IEEE Transactions on Automatic Control* **57**(8): 1898–1917. DOI: [10.1109/TAC.2012.2195830](https://doi.org/10.1109/TAC.2012.2195830)
- Araki, H. (1999). *Mathematical Theory of Quantum Fields*, Oxford.
- Belavkin, V. (1983). Theory of control of observable quantum systems, *Automatica and Remote Control* **44**(3): 178–188.
- Belavkin, V. P., G. J. E. (2013). Editorial, *Quantum Information Processing* **12**(3): 1395–1396. DOI: [10.1007/s11128-012-0494-4](https://doi.org/10.1007/s11128-012-0494-4)
- Bennett, C. (1995). Quantum information and computation, *Physics Today* pp. 24–30. DOI: [10.1063/1.881452](https://doi.org/10.1063/1.881452)
- Bertlmann, R.A., K. P. (2008). Bloch vectors for qubits, *J. Phys. A: Math.Theor.* **41**(23): 235303. DOI: [10.1088/1751-8113/41/23/235303](https://doi.org/10.1088/1751-8113/41/23/235303)
- Breuer, H.-P., P. F. (2003). *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press.
- Butkovskii, A., S. Y. (1979). Control of quantum systems, *Automatica and Remote Control* **40**: 485–502, 629–645.
- Dahleh, M., P. A. R. H. (1987). Optimal control of quantum mechanical systems: Existence, numerical approximations and applications, *Physical Review A* **37**(12): 4950–4964.
- D'Alessandro, D. (2008). *Introduction to Quantum Control and Dynamics*, Chapman & Hall/CRC.
- Dowling, J.P., M. G. (2003). Quantum technology: the second quantum revolution, *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond.* **361**(1809): 1655–1674. DOI: [10.1098/rsta.2003.1227](https://doi.org/10.1098/rsta.2003.1227)
- Huang, G.M., T. T. C. J. (1983). On the controllability of quantum-mechanical systems, *J. Math. Phys.* **24**: 2608–2618. DOI: [10.1063/1.525634](https://doi.org/10.1063/1.525634)
- Ramakrishna, V., R. H. (1996). Relation between quantum computing and quantum controllability, *Phys. Rev. A* **54**: 1715–1716.
- Schumacher, B. (1995). Quantum coding, *Phys. Rev. A* **51**: 2738–2747. DOI: [10.1103/PhysRevA.51.2738](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.51.2738)