

# Controle Preditivo baseado em Modelo aplicado ao Controle de Sistemas Quânticos

Gabriel S. Silva<sup>1</sup>, Tales A. Jesus<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Bolsista de Graduação CAPES/PIBIC - Departamento de Computação  
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais (CEFET-MG)  
Caixa Postal 30510-000 – Belo Horizonte – MG – Brazil

<sup>2</sup>Orientador do projeto - Departamento de Computação  
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais (CEFET-MG)  
Caixa Postal 30510-000 – Belo Horizonte – MG – Brazil

**Abstract.** *Recent technological advances have generated several works in the area of quantum control. Within the scope of this line of research, the present work deals with the problem of controlling a quantum system whose dynamics are described by Schrödinger's research, with the objective of preparing quantum states. For this purpose, a Model-Based Predictive Control (MPC) strategy was used, whose optimizations were solved using two different optimization techniques. As it was a one-year project, we compiled all the strategies used for the final solution, as well as all the idealizations and theoretical procedures. At the end, the algorithms used and the results obtained in each of the steps are presented.*

**Resumo.** *Os avanços tecnológicos recentes impulsionaram diversos trabalhos na área de controle quântico. No âmbito dessa linha de pesquisa, o presente trabalho trata do problema de controle de um sistema quântico cuja dinâmica é descrita pela equação de Schrödinger, tendo por objetivo a preparação de estados quânticos. Para esse propósito utilizou-se a estratégia de Controle Preditivo baseado em Modelo (MPC), cujas otimizações foram solucionadas utilizando-se duas técnicas de otimização diferentes. Se tratando de um trabalho de um ano, compila-se todas as estratégias utilizadas para a solução final bem como todas as idealizações e procedimentos teóricos. Ao final, são apresentados os algoritmos utilizados e os resultados obtidos em cada uma das etapas.*

## 1. Introdução

O avanço tecnológico visto nas últimas décadas impulsionou o interesse na mecânica quântica para o desenvolvimento de aplicações, haja vista o computador quântico, além dos algoritmos de criptografia quânticos. Como reflexo disso, uma série de trabalhos que abordam o controle de sistemas quânticos têm sido publicados e os desafios são muitos, considerando-se diversos aspectos, dentre eles a questão da controlabilidade de tais sistemas [Hashimoto et al. 2012].

A equação de Schrödinger é essencial para a descrição da dinâmica de sistemas quânticos. A partir dela busca-se a evolução espacial e temporal para a função

de onda de uma partícula. A função de onda representa, de certa forma, a propagação de uma partícula em um meio em função da posição e do tempo [Griffiths 2012]. No entanto, o que se obtém com a função de onda é a distribuição espacial do objeto e, portanto, se faz necessário o uso da probabilidade para identificar a possibilidade de se encontrar a partícula num determinado ponto  $x$ , no instante  $t$  [Griffiths 2012]. A resolução da equação oferece uma grande quantidade de resultados para diversos valores de espaço e tempo, e não obstante, ainda é possível aumentar essa gama de resultados realizando uma combinação linear, superposição de estados, dos resultados já existentes, obtendo sistemas de diferentes níveis quânticos. Um dos mais importantes sistemas de níveis diferentes é o sistema de dois níveis pois existem inúmeros casos onde, em primeira aproximação, um sistema complexo pode ser tratado como um sistema de dois níveis [Cohen-Tannoudji et al. 1977]. Essa mudança de estado físico a partir do tempo é o primeiro passo para a construção de métodos de controle para sistemas quânticos [Hashimoto et al. 2012], como é o caso do controle quântico ótimo (QOC).

O QOC é crucial para se construir e manipular um sistema quântico complexo [D'Alessandro 2021]. Em linhas gerais, um controle ótimo se debruça sobre o problema de controlar um sistema  $f(x,u)$  e minimizar, simultaneamente, um funcional do estado  $x$  e do controle  $u$  [Lisboa 2015]. Problemas de controle de sistemas quânticos podem ser formulados de maneira natural dentro do arcabouço teórico do Controle Ótimo [Lisboa 2015]. O desenvolvimento dos princípios gerais da teoria de controle quântico é uma tarefa essencial para o futuro da tecnologia quântica [Dowling and Milburn 2003]. Então, propõe-se o uso do Controle Preditivo baseado em Modelo (MPC), que trata-se de uma classe de algoritmos de controle computacionais que utiliza um modelo de processo que prevê a resposta futura de uma planta [Qin and Badgewell 2003], para a manipulação de estados de um sistema quântico cujo objetivo é a preparação de estado quântico, partindo-se de um estado arbitrário, em direção a um estado alvo. As estratégias de controle preditivo costumam ser justificadas pelas capacidade de lidar com restrições, referências futuras, entre outros. Para o problema em questão, a solução de controle ótimo sem restrições já foi proposta em trabalhos relacionados [Lisboa 2015], destarte, o trabalho produzido limita a solução obtida pelo controle preditivo por meio de uma restrição.

A família de controles preditivos utiliza, em sua base, o princípio dos algoritmos de otimização com a finalidade de encontrar os valores de controle para a próxima iteração. Desses algoritmos, o presente trabalho estuda o gradiente conjugado (CG) e o algoritmo genético (GA). Para funções unimodais, o método do gradiente conjugado rapidamente converge para um ótimo enquanto o algoritmo genético também alcança no entanto, em um tempo mais elevado [Bethke 1978]. Ademais, funções que tem um comportamento matemático complicado e funções que apresentam um ruído, tem uma performance superior quando se utiliza algoritmos genéticos [Bosworth et al. 1972]. A utilização destes dois métodos se torna importante para o trabalho pois a eficiência do gradiente conjugado revela as propriedades da matriz quântica, enquanto a eficácia do algoritmo genético demonstra a codificação por meio de um conjunto de parâmetros menos complexos que os parâmetros quânticos.

Por meio do controle quântico uma importante subrotina da área de com-

putação quântica se faz possível, a preparação de estados quânticos. Um dos primeiros requisitos para a instauração de um computador quântico e de algoritmos de computação quântica é a habilidade de preparar um estado quântico arbitrário [Volya and Mishra 2023]. A forma mais simples de se preparar um estado é partindo de um estado puro em um tempo inicial, e utilizando um operador temporal, alcançar qualquer outro estado [Volya and Mishra 2023][Jorio and Frossard 2019]. Importantes algoritmos quânticos utilizam a preparação de estados em sua primeira etapa, tal qual o algoritmo de Grover.

No presente trabalho propõe-se o uso de um método de controle avançado para a manipulação do movimento de uma partícula a partir da equação que descreve a sua dinâmica, de modo que essa partícula parta de um condição inicial qualquer para um estado alvo. O trabalho está organizado como se segue: na segunda seção, é apresentado o modelo do trabalho definindo, de forma ampla, o MPC e a função objetivo a ser minimizada. Na terceira sessão são apresentadas as heurísticas para a obtenção dos resultados e na quarta sessão são apresentados os resultados e as suas respectivas análises. Finaliza-se o artigo com algumas considerações acerca do estudo.

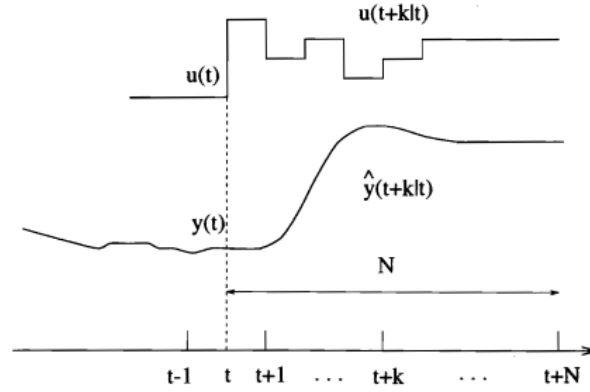
## 2. Modelagem do Sistema de Controle

O termo MPC refere-se a uma larga família de modelos baseados em estratégias de controle em que se obtém uma entrada de controle ótimo por meio da solução de um problema de otimização, seja ele de minimização ou maximização, considerando-se um horizonte de tempo futuro finito. O MPC em tempo discreto tem como características [Faedo et al. 2017]: (i) um modelo matemático do processo que prevê a saída para um horizonte de tamanho  $N$  e (ii) uma função objetivo que é utilizada para se encontrar uma sequência de controle suficiente para minimizar a distância entre o comportamento real e o comportamento desejado.

A metodologia de todos os controles da família MPC pode ser caracterizada pela seguinte estratégia [Camacho and Bordons 1995]: (i) as saídas futuras para um determinado horizonte  $N$ , chamado de horizonte de predição, são preditos a cada instante  $t$  usando o modelo do processo. Essas saídas preditas, representadas pela notação  $y(t+k|t)$ , que indicam o valor de uma variável para um instante  $t+k$  calculado no instante  $t$  para  $k = 1 \dots N$ , dependem do conhecimento dos valores no instante  $t$ , das entradas e saídas passadas bem como os sinais de controle  $u(t+k|t)$  para  $k = 0 \dots N-1$ , o qual é enviado para o sistema para ser calculado. (ii) O conjunto de controles futuros são calculados utilizando-se de artifícios da otimização baseando-se em uma trajetória de referência  $w(t+k)$ . O critério de parada ocorre quando a curva predita está suficientemente perto da trajetória  $w$ , que pode ser calculada usualmente como a função quadrática dos erros entre o sinal de predito e o sinal de referência. (iii) O sinal de controle  $u(t|t)$  é enviado para o processo enquanto os próximos sinais de controle são rejeitados, porque o próximo instante de amostragem  $y(t+1)$  já é conhecido e o item (i) é repetido com os novos valores. Então  $u(t+1|t+1)$  é calculada, onde a princípio é diferente de  $u(t+1|t)$  pois a sequência de valores da entrada é diferente.

A estratégia do MPC, descrita acima, pode ser ilustrada por meio da figura 1.

Nesta, pode-se observar a curva estimada  $y(t)$  e os seguintes ajustes com o horizonte de tempo  $N$ , representado por  $\hat{y}(t+k|t)$  que são possíveis por meio dos valores de controle impostos, representado pela curva em  $u$ .



**Figura 1. Gráfico representativo do controle preditivo de Modelo. Fonte: [Camacho and Bordons 1995]**

## 2.1. Construções estudadas

### 2.1.1. Função objetivo - Forma padrão

Em um primeiro momento, estudou-se a fundo a equação de Schrödinger, em sua forma completa, como descrito pela equação 1:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\psi(x,t) \quad (1)$$

Para um problema de controle, a equação acima se torna muito complexa, visto as derivadas parciais. É comum, em processos de controle, a representação matricial, como espaço de estados, e portanto, as derivadas parciais devem ser representadas como tal.

A variável  $\psi$  é o destaque dessa equação e o seu significado é determinado pelo processo estatístico. A integral do módulo ao quadrado do  $\psi$  representa a probabilidade de uma partícula ser encontrada em uma certa posição em um certo momento. Portanto, por meio das derivadas parciais e do potencial  $V$  se torna possível analisar o comportamento de uma partícula no tempo.

A solução dessa equação pode ser encontrada em diversas literaturas [Griffiths 2012][Sakurai 1994], e diversos artigos apresentam análises de acordo com as considerações de potencial para  $V$  e os valores de fronteira. Para a análise desse trabalho, considerou-se o resultado projetado por [Hashimoto et al. 2012] com a consideração de um oscilador harmônico simples ao invés de um poço quadrado infinito.

**Aproximação de Crank-Nicolson** Utilizado para simplificar equações diferenciais parciais, nesse caso a equação 1, o método de Crank-Nicolson mostra que a derivada parcial pode ser aproximada por uma secante, portanto é possível estabelecer

uma diferença conforme visto na definição de derivada sem a utilidade do limite (dessa forma a variação do denominador não será nula o suficiente para termos uma tangente).

$$\frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta t} \quad (2)$$

**O método das diferenças finitas** Utilizado para resolver problemas com valor inicial ou problemas de contorno para equações diferenciais ordinárias e parciais (EDO e EDP), este será útil para a equação 1. Como se trata de equações diferenciais parciais, pode-se dizer que a variável independente da equação é  $x$  e a tarefa é discretizá-la (Dividir em subdomínios). Para um domínio semi-infinito os subdomínios podem ser representados como,  $0, 1, 2, \dots, i-1, i, i+1$ .

O próximo passo é gerar as aproximações para obter  $\dot{\psi}_i$  e  $\ddot{\psi}_i$  nos pontos discretos  $x_i$  utilizando  $\psi$ . Após a aproximação, aplica-se a EDP gerando sistemas de equações álgebra na forma:  $f(\psi_i)=0$ , de forma que  $f$  se refira ao vetor das equações algébricas que depende de valores de  $\psi_i$ . De fato, a aplicação do método da discretização resolve-se localmente, em cada  $x_i$  e o seu resultado é um conjunto enumerável.

**Aproximação de derivadas** Como as diferenças finitas são usadas para resolver equações diferenciais, podemos expandir em série de Taylor em torno de um  $\psi(x_{i+1}) = \psi_{i+1}$ , então o valor de  $\psi_{i+1}$  pode ser definido como:

$$\psi_{i+1} = \psi_i + \dot{\psi}_i(x_{i+1} - x_i) + \ddot{\psi}_i \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2} + \dots \quad (3)$$

Enquanto que, para  $\psi(x_{i-1}) = \psi_{i-1}$

$$\psi_{i-1} = \psi_i - \dot{\psi}_i(x_i - x_{i-1}) + \ddot{\psi}_i \frac{(x_{i-1} - x_i)^2}{2} + \dots \quad (4)$$

**Comprimento do domínio**

$$h_i = x_i - x_{i-1} \quad (5)$$

Com o objetivo de isolar a primeira derivada e limitar as superiores pode-se realizar a seguinte operação:

$$h_i^2 \psi_{i+1} - h_{i+1}^2 \psi_{i-1} = (h_i^2 - h_{i+1}^2) \psi_i + (h_i^2 h_{i+1} + h_i h_{i+1}^2) \dot{\psi}_i + \ddot{\psi}_i (h_i^2 h_{i+1}^2 - h_{i+1}^2 h_i^2) + \dots \quad (6)$$

Com essa subtração, o termo de segundo grau sumirá, e isso é importante, visto que há um solução para ele. Isolando a primeira derivada obtemos:

$$\dot{\psi}_i = \frac{h_i^2 \psi_{i+1} + (h_{i+1}^2 - h_i^2) \psi_i - h_{i+1}^2 \psi_{i-1}}{h_i^2 h_{i+1} + h_i h_{i+1}^2} + O\left(\frac{\text{Série de Taylor} \geq 3}{h_i^2 h_{i+1} + h_i h_{i+1}^2}\right) \quad (7)$$

O termo que soma a fração indica que os valores tendem a 0 e portanto significa que teremos uma derivada exata. Chamamos isso de erro de truncamento. Para a nossa aproximação ignoraremos o erro de truncamento.

**Malha uniforme** Em uma malha uniforme a diferença no domínio em  $i$ , dada por  $h$  é a mesma, ou seja:

$$h_i = h, \forall i \quad (8)$$

Portanto:

$$\dot{\psi}_i = \frac{h^2 \psi_{i+1} + (h^2 - h^2) \psi_i - h^2 \psi_{i-1}}{h^2 h + h h^2} = \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{2h}$$

E essa é a diferença central da primeira derivada. Como é uma malha uniforme, a diferença é a mesma:

$$\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{h} = \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{h} \quad (9)$$

O próximo passo é obter para a segunda derivada sumindo com a primeira derivada. Assim  $h_i$  multiplica  $\psi_{i+1}$ ,  $h_{i+1}$ ,  $\psi_{i-1}$ .

$$h_i \psi_{i+1} - h_{i+1} \psi_{i-1} = (h_i - h_{i+1}) \psi_i + (h_i h_{i+1} + h_i h_{i+1}) \dot{\psi}_i + \ddot{\psi}_i (h_i h_{i+1}^2 + h_{i+1} h_i^2) + \dots \quad (10)$$

Isolando o  $\ddot{\psi}_i$ :

$$\ddot{\psi}_i = \frac{h_i \psi_{i+1} - (h_{i+1} + h_i) \psi_i + h_{i+1} \psi_{i-1}}{\frac{h_{i+1}^2 h_i + h_{i+1} h_i^2}{2}} + O\left(\frac{\text{Série de Taylor} \geq 3}{\frac{h_{i+1}^2 h_i + h_{i+1} h_i^2}{2}}\right) \quad (11)$$

Portanto, tendendo  $z \rightarrow 0$  e  $h_i = h$ , obtemos:

$$\ddot{\psi}_i = \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} \quad (12)$$

**Além do implícito e explícito** Crank-Nicolson é justamente um método para segundo grau no tempo e espaço. Provadamente estável então é uma ótima aproximação para a tarefa.

$$f_{i+1/2} = \frac{1}{2}(f_i + f_{i+1})$$

$$f_{i+1/2} = 1/2(f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1}))$$

Em (11) obtemos o caso para a segunda derivada então basta substituir, supondo que f seja a segunda derivada de uma função. Então para Crank-Nicolson a segunda derivada equivale à:

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{y_{i+1}^t - 2y_i^t + y_{i-1}^t + y_{i+1}^{t+1} - 2y_i^{t+1} + y_{i-1}^{t+1}}{h^2} \quad (13)$$

Então a variação no tempo existe para um espaço homogêneo.

**Representação algébrica** Dada a equação 1 deste trabalho, podemos reinterpreta-la como:

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\Delta t} \quad (14)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{2\Delta x^2} [(\psi_{i+1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1}) + (\psi_{i+1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i-1}^n)] \quad (15)$$

$$V(x, t)\psi(x, t) = 1/2[V_i^{n+1}\psi_i^{n+1} + V_i^n\psi_i^n] \quad (16)$$

$$\frac{i\hbar}{\Delta t} [\psi_i^{n+1} - \psi_i^n] = \frac{-\hbar^2}{4m\Delta x^2} [(\psi_{i+1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i-1}^{n+1}) + (\psi_{i+1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i-1}^n)] + \frac{1}{2} [V_i^{n+1}\psi_i^{n+1} + V_i^n\psi_i^n] \quad (17)$$

Para fins de simplificação utilizaremos  $a = \frac{-\hbar^2}{4m\Delta x^2}$ , dessa forma:

$$\frac{i\hbar}{\Delta t} \psi_i^{n+1} - 2a\psi_i^{n+1} - \frac{1}{2}V_i^{n+1}\psi_i^{n+1} = \frac{i\hbar}{\Delta t} \psi_i^n - 2a\psi_i^n - \frac{1}{2}V_i^n\psi_i^n - a\psi_{i+1}^{n+1} - a\psi_{i-1}^{n+1} - a\psi_{i+1}^n - a\psi_{i-1}^n$$

E para melhorar a solução podemos observar a evidência de  $\psi_i^n$  e  $\psi_i^{n+1}$  e destacar que:

$$b_i = \frac{i\hbar}{\Delta t} - 2a - 1/2V_i^{n+1} \quad (18)$$

$$c_i = \frac{i\hbar}{\Delta t} + 2a + 1/2V_i^n \quad (19)$$

$$a\psi_{i+1}^{n+1} + b_i\psi_i^{n+1} + a\psi_{i-1}^{n+1} = -a\psi_{i+1}^n + c_i\psi_i^{n+1} - a\psi_{i-1}^n \quad (20)$$

Assim obtemos quatro matrizes capazes de estabelecer uma relação, mesmo que incompleta,  $A\psi_i^{k+1} = B\psi_i^k$ , onde:

$$A\psi^{k+1} = \begin{bmatrix} b_1 & a & 0 & & 0 & 0 \\ a & b_2 & a & 0 & & \\ 0 & a & & & & \\ & & & & 0 & \\ 0 & & & & a & \\ 0 & 0 & -0 & a & b_M & \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0^{k+1} \\ \psi_1^{k+1} \\ \vdots \\ \psi_M^{k+1} \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$B\psi^k = \begin{bmatrix} c_1 & -a & 0 & & 0 & 0 \\ -a & c_2 & -a & 0 & & \\ 0 & -a & & & & \\ & & & & 0 & \\ 0 & & & & -a & \\ 0 & 0 & -0 & -a & c_M & \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0^k \\ \psi_1^k \\ \vdots \\ \psi_M^k \end{pmatrix} \quad (22)$$

### 2.1.2. Função objetivo - Notação de Dirac

Em um segundo momento, para que fosse possível definir a função objetivo, recorre-se à equação de Schrödinger utilizando-se a notação de Dirac. Portanto, dessa forma, representa-se a função de onda  $\Psi(x,t)$ , que é o estado quântico dado na base das autofunções do operador posição, a partir dos coeficientes de expansão de  $|\psi\rangle$ , um vetor abstrato no espaço de Hilbert, ou seja [Griffiths 2012]:

$$\Psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle \quad (23)$$

Essa transformação é importante por questão de eficiência computacional, já que a modelagem discreta depende da equação de Schrödinger, que sem essa transformação depende de  $x$  e  $t$ , quando  $x$  compreende toda a reta real. Compreendendo que os estados quânticos podem ser escritos como uma combinação linear de outros estados, e ainda que  $|0\rangle = [1 \dots 0]^T$ ,  $|1\rangle = [0 \ 1 \dots 0]^T$ ,  $\dots$ ,  $|n\rangle = [0 \dots 1]^T$ ,  $|\psi\rangle$  pode ser representado como:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle + \dots + \zeta|n\rangle = [\alpha \ \beta \dots \zeta]^T, \quad (24)$$

que, por consequente, altera a equação de Schrödinger, a qual assume a seguinte forma na notação de Dirac:



$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (25)$$

em que  $H$  representa o operador hamiltoniano, que codifica em si a energia do sistema quântico [Griffiths 2012]. Representa-se o hamiltoniano por uma matriz  $2 \times 2$ , para um sistema de dois níveis, em que a diagonal principal é composta pelas energias do estado 0 e estado 1 [de Toledo Piza 2001]:

$$H_{livre} = \begin{bmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{bmatrix} \quad (26)$$

Para representar o controle ótimo em um hamiltoniano adiciona-se uma matriz cuja diagonal secundária consiste em números complexos conjugados [de Toledo Piza 2001], fazendo com que esta seja uma matriz hermitiana, o que é fundamental para a representação de sistemas quânticos reais:

$$H_c = \begin{bmatrix} 0 & u \\ u^* & 0 \end{bmatrix}, \quad (27)$$

em que  $u$  representa a variável de controle utilizada para se guiar a evolução temporal do estado quântico do sistema.

Dessa forma, define-se o hamiltoniano total  $H$  como

$$H = H_{livre} + H_c. \quad (28)$$

A partir dessas definições, o seguinte problema de otimização é proposto:

$$\begin{aligned} \arg \min_{u(k), \dots, u(k+h)} E(u(k), \dots, u(k+h)) = \\ \sum_{n=k}^{k+h} || |\psi(n, u(n-1))\rangle - |\psi_d(n)\rangle ||^2, \end{aligned} \quad (29)$$

sujeito a,

$$-5 \leq u(k) \leq 5 \quad (30)$$

em que  $k$  é a iteração do MPC,  $u(k)$  é o primeiro valor da sequência de controle na  $k$ -ésima iteração,  $u(k+h)$  é o último valor da sequência de controle na  $k$ -ésima iteração,  $E(u(k), \dots, u(k+h))$  é a função objetivo definida para a  $k$ -ésima iteração do MPC,  $|\psi(n, u(n-1))\rangle$  é o estado no instante discreto  $n$ , que é função do controle  $u(n-1)$  no instante imediatamente anterior,  $|\psi_d(n)\rangle$  é o estado desejado no instante discreto  $n$ . Dentro do somatório, o que se define é a soma dos quadrados dos módulos das diferenças entre o estado real  $|\psi(n, u(n-1))\rangle$  e o estado desejado  $|\psi_d(n)\rangle$ , isto é, a soma acumulada do erro de rastreamento em uma janela de tempo que vai do instante  $k$  ao instante  $k+h$ . Com a solução do  $k$ -ésimo problema de otimização, utiliza-se o primeiro valor do vetor retornado  $\vec{u}$  no hamiltoniano de controle  $H_c$  e evolui-se o sistema quântico dado pela Equação 25

para que na próxima iteração o estado real esteja mais próximo do estado desejado. A evolução do sistema quântico é feito por meio da discretização da Equação 25 utilizando-se o algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem (ver subceção 2.2).

## 2.2. Seleção de parâmetros para resolução do problema

Partindo da proposta do trabalho, o sistema estudado é de dois níveis, portanto,  $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle = [c_0 \ c_1]^T$ , considerando-se como condição inicial  $c_0 = 1$  e  $c_1 = 0$ , ou seja,  $|\psi\rangle = |0\rangle$ , e tendo-se por objetivo alcançar o estado  $|\psi_d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle = [\frac{1}{\sqrt{2}} \ \frac{1}{\sqrt{2}}]^T$ . Ambos os estados apresentam probabilidade  $|c_n|^2$  de se obter um valor determinado  $E_n$  ao se medir a energia e, ainda, atenden à condição de que a soma dessas probabilidades resulta em 1 [Griffiths 2012].

Além disso, como define a Equação 25, para que se obtenha os resultados correspondentes à evolução temporal do sistema quântico controlado pelo MPC, é preciso que se conheça a equação que descreve o comportamento temporal do estado desejado, enquanto que para o estado real é preciso que se lance mão de uma aproximação visto que esse estado não é totalmente isolado, e portanto não é possível obter uma solução analítica para a equação de Schrödinger. Para resolver a equação para a evolução temporal do estado desejado propõe-se que a partícula se comporta como se estivesse submetida ao potencial de um oscilador harmônico simples, de forma que valem as soluções  $|\psi_n(t)\rangle = |\psi_n(0)\rangle e^{-iE_nt/\hbar}$ :  $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ , portanto,  $E_1 = \hbar\omega/2$  e  $E_2 = 3\hbar\omega/2$ . Para decrever a evolução temporal do estado real da partida utiliza-se o método Runge-Kutta de quarta ordem com o objetivo de se discretizar a Equação de Schrödinger. Para que o estado real multiplicado pelo Hamiltoniano corresponda aproximadamente de fato à derivada presente na Equação 25, utilizaram-se 0,1 e 0,01 como passos de discretização para o algoritmo de Runge-Kutta.

## 2.3. Controlabilidade quântica e empirismo

Supondo um sistema de controle quântico, é necessário o conceito teórico de controlabilidade para entendermos os experimentos factíveis que podem ser executados [Lisboa 2015]. Observando a equação 25, pode-se descrevê-la de uma forma mais geral, tal como:

$$\dot{X}(t) = -iH(u(t))X(t) \quad (31)$$

Por ela, devemos estudar o conjunto de matrizes unitárias, que podem ser obtidas mudando-se os controles para este sistema, ou seja, os estados alcançáveis do sistema. Neste trabalho, consideramos a definição de [Lisboa 2015] de conjunto alcançável. Supondo um sistema, dado um  $u(t)$ , assume-se que este seja solução da equação acima, de forma a ser representado da seguinte forma,  $X(u(t), t)$ , uma solução com o controle  $u(t)$  no tempo  $t$ , no qual, o conjunto alcançável no tempo  $T > 0$ , é o conjunto de todas as matrizes unitárias  $\bar{X}$  tais que existe um controle  $u$ , com  $X(T, u) = \bar{X}$ . Para analisar a controlabilidade do sistema, partiu-se de uma abordagem empírica e menos matemática, utilizando de repetições por meio dos algoritmos de otimização. Nas seções seguintes, explicitaremos as heurísticas

utilizadas para a obtenção dos valores de controle além dos parâmetros utilizados nos testes.

### 3. Algoritmos de otimização

Para solucionar o problema de minimização utilizaram-se dois algoritmos de otimização: (i) o gradiente conjugado e (ii) o algoritmo genético.

#### 3.1. O gradiente conjugado

O gradiente conjugado (CG) é um método iterativo robusto que pode ser utilizado para a solução de sistemas do tipo  $\vec{A}\vec{x} = \vec{b}$ , em que  $\vec{A}$  é simétrica e positiva definida [Cunha et al. 2015]. Para o caso do sistema quântico definido, o Hamiltoniano  $\vec{H}$ , dado pela equação 6, tem as mesmas propriedades de simetria da matriz  $\vec{A}$ , pois a ação de controle  $u$  utilizada somente assume valores que são reais. e portanto o valor de  $u$  é igual ao seu complexo conjugado  $u^*$ , e assim o Hamiltoniano é igual ao seu transposto. O Hamiltoniano também é uma matriz positiva definida, requisito para o uso do gradiente conjugado, pois os valores assumidos pela variável de controle  $u$  são positivos, de forma que os primeiros menores da matriz são positivos. Portanto, pode-se utilizar o gradiente conjugado para solucionar o problema.

#### 3.2. O algoritmo genético

O algoritmo genético (GA) é uma variante de busca em feixe estocástica na qual os indivíduos sucessores são gerados pela combinação de dois indivíduos pais [Russell and Norvig 2013]. Baseando-se na seleção natural, o algoritmo começa com a geração de uma população de tamanho  $n$ , em que cada indivíduo dessa população é formado por uma sequência de controle  $\vec{u}$ , em que o horizonte  $h$  define o tamanho desse vetor e  $\vec{u} \in \{\mathbb{R}_*^+\}^h$ . Cada indivíduo é avaliado por uma função de adaptação. Uma função de adaptação deve retornar valores mais altos para indivíduos melhores [Russell and Norvig 2013] e para isso, propõe-se para a função de *fitness* o uso de uma proporção de forma que ocorra uma normalização dos estados e portanto, estados melhores apresentem mais chance de serem escolhidos. Dois indivíduos são selecionados para reprodução de acordo com as probabilidades dimensionadas anteriormente. Para cada par cruzado se realiza um cruzamento aritmético, à guisa de uma combinação convexa, em que um dos pais recebe uma probabilidade  $a$  de participar das definições do filho enquanto o outro  $1 - a$ . Após o cruzamento, os filhos substituem os pais e, caso não se cruzem, os pais continuam na população. Finalmente, cada posição está sujeita à mutação aleatória com uma pequena probabilidade independente [Russell and Norvig 2013], e para o vetor de sequências de controle, cada mutação realiza uma transformação no seu valor de modo que o indivíduo passa a ter um valor normalizado por uma função gaussiana.

Para o algoritmo genético os seguintes parâmetros foram utilizados:

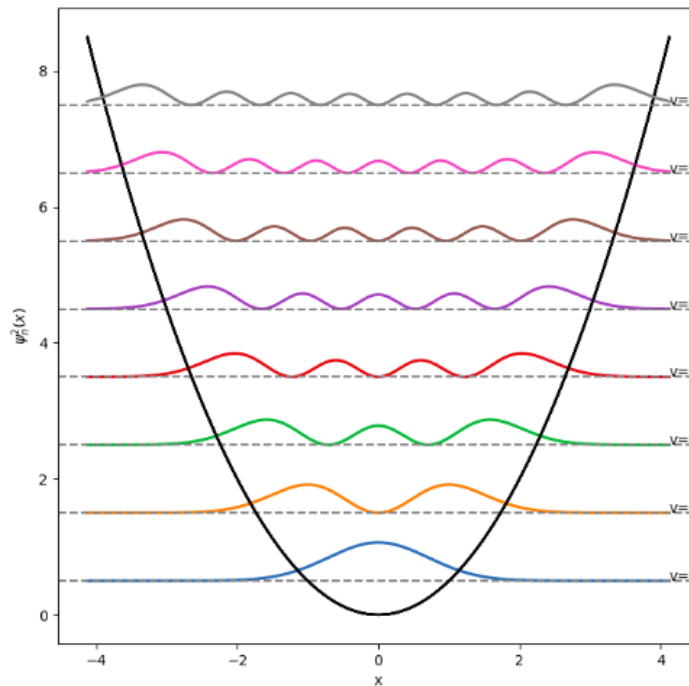
**Tabela 1. Valores dos parâmetros para o GA**

Parâmetros	Valores
Tamanho da População	50
Taxa de mutação	1%
Taxa de cruzamento	70%
Número de gerações	100
Taxa de elitismo	20%
Tamanho do vetor de controle	50

## 4. Resultados e Análises

### 4.1. Resultados para a primeira abordagem

De acordo com a equação de Schrödinger, a solução para a equação pode ser determinada pela combinação linear de cada  $\psi_n(x)$  para todo  $n$  pertencente aos naturais. Neste trabalho combinaremos as respostas em 0 e 1 com o valor constante de 0.80 e 0.60 suficiente para que a soma de seus quadrados dê 1. Na figura 2 estão as curvas com o polinômios de Hermite para graus maiores que 1.

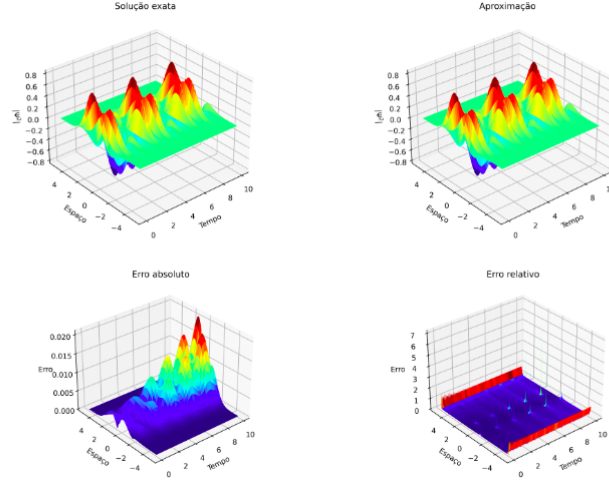


**Figura 2. Diversas combinações de estado**

Inicialmente, a combinação dos estados 0 e 1, se torna importante por refletir seu comportamento em sistemas mais complexos. No entanto, essa simplificação não é suficiente para representar seu movimento sendo necessário a utilização dos processos de aproximação de derivadas.

No processo de Crank-Nicolson, a aproximação de derivadas ocorre por diferenças, especificamente, uma média entre a aproximação posterior e anterior de

um ponto relacionado. Para atestar essa aproximação, verifica-se a diferença entre a evolução do estado pela solução real e a solução aproximada obtendo assim os gráficos da figura 3.



**Figura 3. Erros para a aproximação de Crank-Nicolson**

Vale ressaltar que os erros dos quais realizam uma comparação com zero apresentam uma tendência a ir ao infinito devido a sua divisão, no entanto, isso não invalida a aproximação. Desse modo, devido a aproximação suficiente, pode-se estudar o controle de estados por meio da equação 1. Considerando a aplicação do controle de sistemas quânticos no potencial  $V$  da equação, obtêm-se:

$$V(x,t) = \frac{1}{2}m\omega x^2 + u(t) \quad (32)$$

Com a aplicação do potencial, é desejado que alcancemos o estado  $\psi_d(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 + \psi_1)$  a partir do estado  $\psi_i(t) = 0.80\psi_0 + 0.60\psi_1$ , no entanto, ao realizar a aproximação de Crank-Nicolson, é necessário que a matriz obtida seja do tamanho do espaço de análise e no caso, uma análise boa de sistemas quânticos ocorre em um grande espaço em  $\mathbb{R}^2$ , gerando um grande custo computacional. Com esse extenso custo computacional, a realização matemática do controle e a simulação são evidentes em trabalhos como [Hashimoto et al. 2012].

#### 4.2. Resultados para a segunda abordagem

A fim de avaliar a qualidade do controle MPC considerando-se os algoritmos de otimização selecionados para o presente trabalho, foi realizada uma série de experimentos que envolveram dois tipos de cenários de discretização de tempo e outros doze cenários para avaliação da atuação do controle no horizonte. Além desses cenários, entendeu-se que um tempo de simulação de dez segundos seria o suficiente para a obtenção dos resultados. Na representação gráfica do resultado  $|\psi(t)\rangle$  do sistema de controle quântico, assumiu-se que a separação em quatro gráficos tornaria a exposição melhor, bem como a explicação dos resultados. A separação em quatro gráficos é interessante pois o sistema quântico de dois níveis é definido como:

$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ , em que as componentes  $c_0$  e  $c_1$  são números complexos, de modo que cada componente tem a sua representação gráfica. Para a componente  $c_0$  representa-se a sua parte real e imaginária em gráficos separados, de forma que cada uma das componentes sejam descritas por dois gráficos. Faz-se isso para o comportamento real e para o comportamento desejado, de maneira que seja factível a sua comparação.

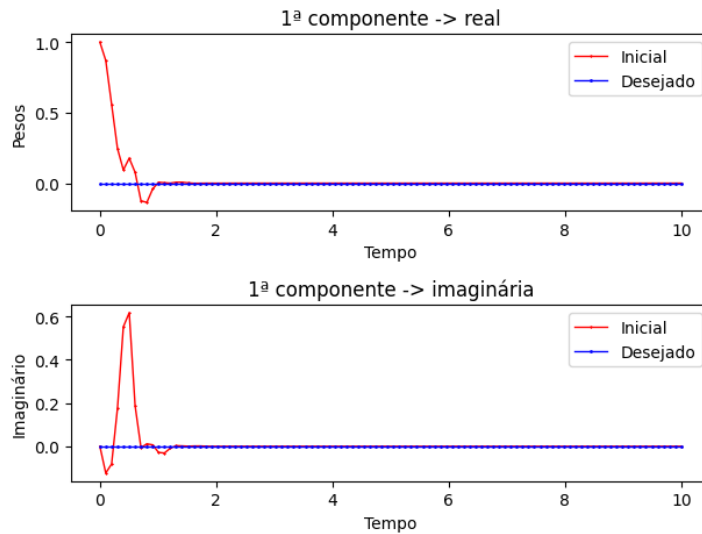
#### 4.3. Implementação do sistema de controle com $\Delta t = 0,1s$

Conforme o desejado e a partir do estipulado pela Tabela 2, o objetivo é partir do estado inicial  $|\psi(0)\rangle = 1|0\rangle + 0|1\rangle$  e alcançar o estado alvo  $|\psi_d(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ .

**Tabela 2. Valores para o experimento**

Parâmetros	Valores
Horizonte (em amostras)	3 – 10
Passo de discretização (em segundos)	0.1

Os resultados dos gráficos dados pelas Figuras 4, 5, 6, 7 foram produzidos utilizando-se o algoritmo gradiente conjugado, e eles nos revelam o quanto horizonte interfere no desempenho do sistema de controle quântico. Por mais que o custo computacional aumente, a interpretação visual de um horizonte de três amostras (0,3 segundos, portanto) demonstra um atraso entre o comportamento real do sistema quântico e o comportamento desejado, enquanto que para em um horizonte de tamanho igual a dez amostras (1 segundo) ainda existe tal defasagem, porém bem menos acentuada. Uma forma de avaliar a interferência do horizonte é a verificação dos valores da função objetivo. É desejado que, quanto maior o horizonte, mais próximo de zero deva ser o valor da função objetivo. A partir da análise da Tabela 3, que representa os valores da função objetivo com horizontes de três à dez amostras, pode-se verificar isso.



**Figura 4. Gráfico representativo do controle para o horizonte de tamanho 3 (primeira componente; tempo em segundos)**

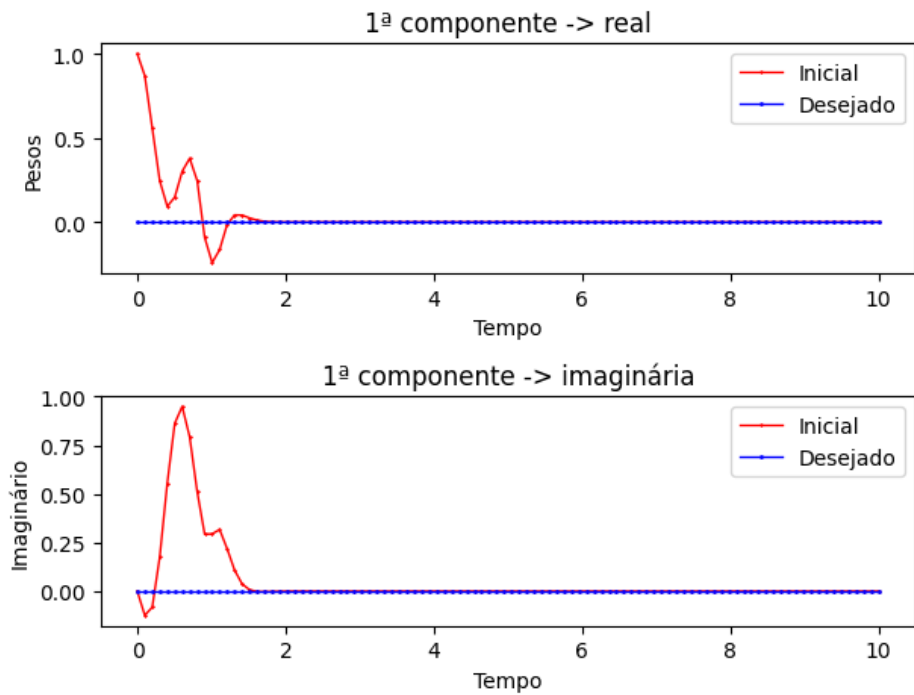


Figura 5. Gráfico representativo do controle para o horizonte de tamanho 10 (primeira componente; tempo em segundos)

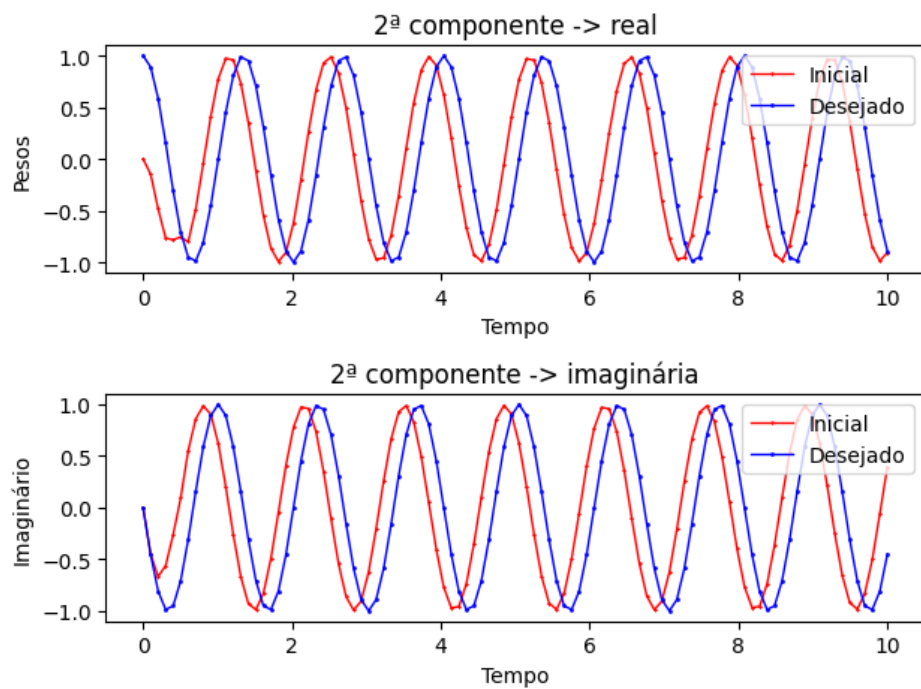
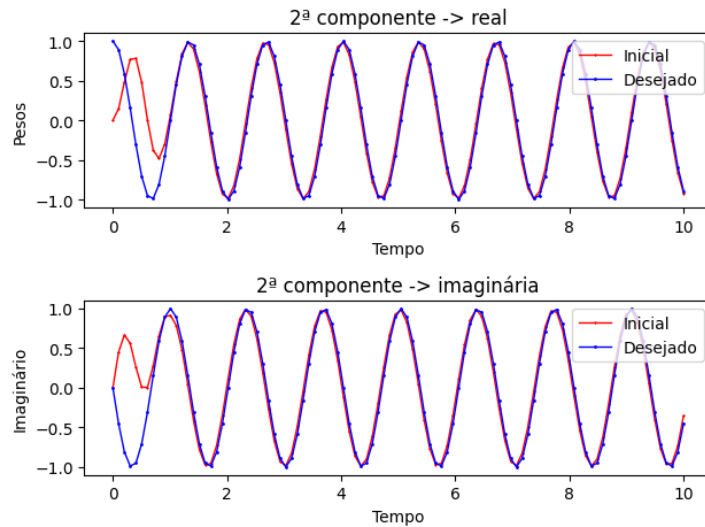


Figura 6. Gráfico representativo do controle para o horizonte de tamanho 3 (segunda componente; tempo em segundos)



**Figura 7. Gráfico representativo do controle para o horizonte de tamanho 10 (segunda componente; tempo em segundos)**

**Tabela 3. Valores obtidos de função objetivo**

CG (270 segundos)		GA (6708 segundos)	
Horizonte	Resultado	Horizonte	Resultado
3	0.3816	3	0.1222
4	0.2347	4	0.0392
5	0.1667	5	0.0861
6	0.1232	6	0.0689
7	0.0064	7	0.0741
8	0.0076	8	0.0351
9	0.0038	9	0.0350
10	0.0059	10	0.0074

O que é possível concluir a partir dos resultados gráficos obtidos é que obteve-se uma melhoria do rastreamento com o aumento do horizonte e, de fato, o MPC deve muito de seu desempenho ao tamanho do horizonte considerado: quanto maior esse horizonte, melhor será a predição do comportamento do sistema dinâmico e, consequentemente, menor será o erro de rastreamento.

Não obstante essa primeira análise semi-quantitativa, a mera inspeção visual dos gráficos não é suficiente para destacar efetivamente as diferenças entre os algoritmos de otimização utilizados. Para isso, realizou-se o cálculo das métricas de controle. Para as métricas de controle, utilizou-se o comportamento da resposta transitória do sistema de controle e índices que refletem o desempenho do sistema [Alt and Lages 2003]. Para essa avaliação, foi selecionado como índice a integral do quadrado do erro (ISE), que atribui grande peso para erros grandes e pequeno peso para erros pequenos. Um sistema que minimiza este índice tende a apresentar uma rápida diminuição em caso de um erro inicial grande [Alt and Lages 2003]. O ISE pode ser definido da seguinte forma:



$$ISE = \int_{t_i}^{t_f} e(t)^2 dt, \quad (33)$$

em que  $t_i$  e  $t_f$  são, respectivamente, os instantes de tempo inicial e final da simulação do sistema de controle quântico.

Outro índice de desempenho utilizado é a integral do erro absoluto multiplicado pelo tempo (ITAE), que reduz a contribuição exagerada do erro nos primeiros instantes e enfatiza o erro presente na resposta em regime permanente. O ITAE pode ser definido da seguinte forma:

$$ITAE = \int_{t_i}^{t_f} t|e(t)|dt \quad (34)$$

Ambas as métricas são apresentadas nas Tabelas 4 e 5 para horizontes de diferentes tamanhos. As duas métricas são equilibradas pois enquanto uma considera todo o percurso para o controle, ISE, o outro considera o que ocorre ao final do processo de controle, se realmente, para o tempo utilizado, ocorreu um bom controle. Devido a multiplicação pelo tempo, espera-se grandes variações em uma análise para o ITAE, ao contrário do ISE que eleva o erro ao quadrado de forma que, um erro menor que 1 continua sendo menor que este.

**Tabela 4. ISE para primeira componente**

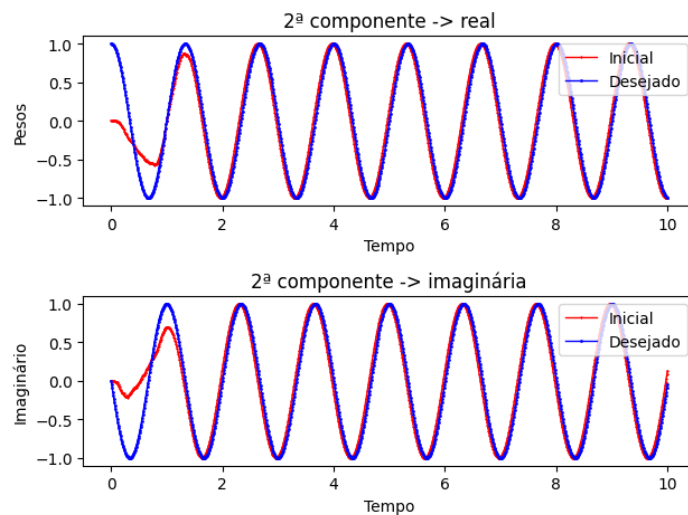
CG		GA	
Horizonte	Resultado	Horizonte	Resultado
3	8.484	4	7.958
4	5.518	5	2.325
5	3.751	6	2.905
6	3.067	7	2.857
7	3.382	8	2.587
7	3.382	8	2.641
9	3.336	9	2.675
10	3.349	10	2.306

**Tabela 5. ITAE para primeira componente**

CG		GA	
Horizonte	Resultado	Horizonte	Resultado
3	42.44	4	40.01
4	31.30	5	10.53
5	24.23	6	16.50
6	19.87	7	7.586
7	5.330	8	11.66
8	5.350	8	2.627
9	5.903	9	8.845
10	6.203	10	3.479

#### 4.4. Efeitos do refinamento da discretização no desempenho do sistema de controle

Para verificar se o algoritmo genético se tornaria melhor com outros valores de parâmetros, fez-se o teste com a estrutura definida na Tabela 6. A alteração dos valores de discretização nos mostra que esse fator modifica a resolução temporal do resultado gráfico, como mostra a Figura 8. De fato, para uma discretização de 0,01s, tem-se 1000 pontos distribuídos, ao invés de 100, como nos gráficos anteriores.



**Figura 8. Gráfico representativo do controle para o horizonte de tamanho 20 (segunda componente; tempo em segundos)**

**Tabela 6. Valores para o experimento**

Parâmetros	Valores
Horizonte (em amostras)	20
Passo de discretização (em segundos)	0.01

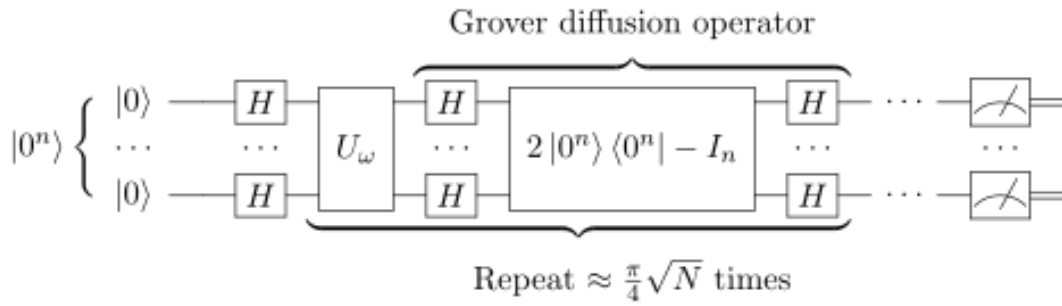
**Tabela 7. Resultados obtidos**

Parâmetros	Valores
ITAE	9.8977
ISE	3.151

O que se observa por meio dos resultados é um bom rastreamento realizado pelo algoritmo genético, bem como o gradiente conjugado. No entanto, é possível melhorar os resultados e, para isso, ajustes são necessários nos fatores, em ordem de prioridade [Otero 2016]: (i) no tamanho da população, (ii) na taxa de cruzamento, (iii) na taxa de mutação e (iv) no número de gerações.

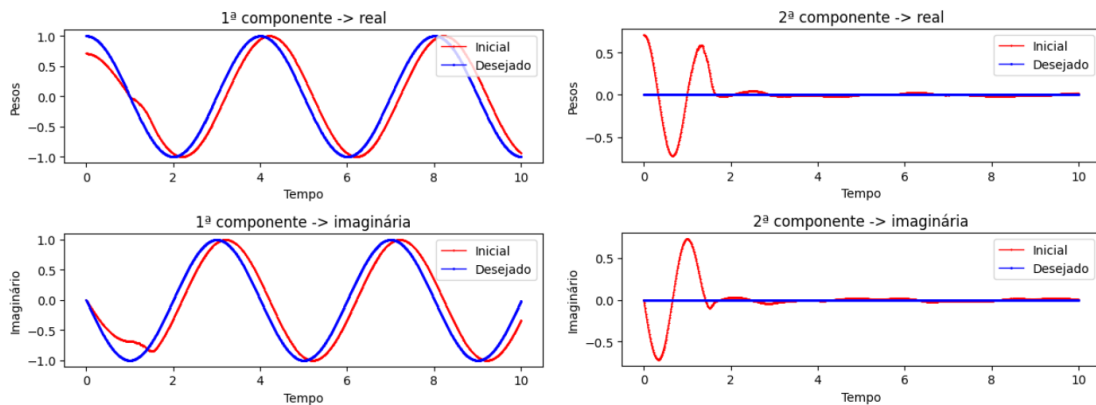
#### 4.5. Preparação de estados quânticos e a ação de controle

Observando a efetividade do controle por meio do cálculo das métricas de erro e da aproximação gráfica, propõe-se a utilização desse sistema para uma entrada qualquer cuja a saída deve ser decidida pelo usuário. Desse modo, esse sistema pode ser utilizado para preparar estados que serão utilizados posteriormente por algoritmos quânticos. Conforme a figura 9, o algoritmo de Grover necessita de entradas no estado zero para que se obtenha a resposta desejada, portanto, para que este algoritmo tenha a entrada desejada apresenta-se três testes realizados com o sistema do trabalho: (i) começa-se em  $|\psi_0(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$  e alcança-se o estado alvo  $|\psi_d(t)\rangle = 1|0\rangle + 0|1\rangle$ , (ii) inicia-se em  $|\psi_0(t)\rangle = 0|0\rangle + 1|1\rangle$  e alcança-se o estado alvo  $|\psi_d(t)\rangle = 1|0\rangle + 0|1\rangle$  e (iii) parte-se de  $|\psi_0(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  e alcança-se o estado alvo  $|\psi_d(t)\rangle = 1|0\rangle + 0|1\rangle$ .

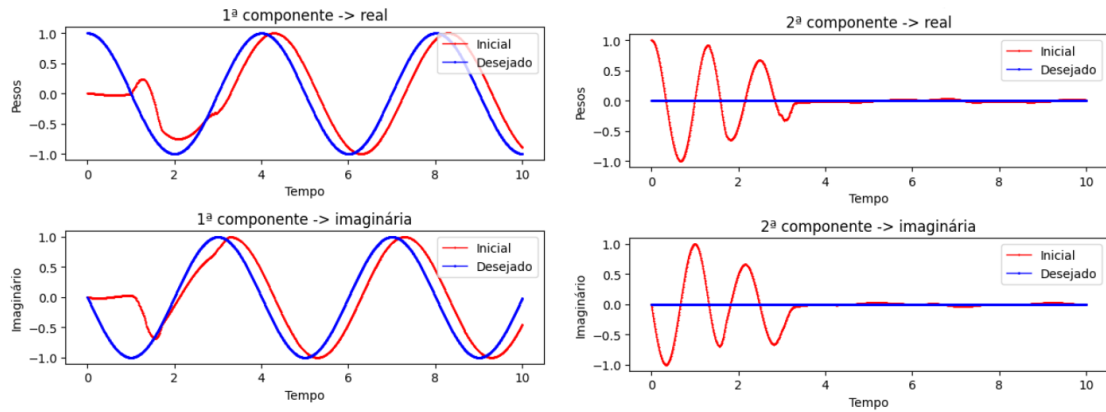


**Figura 9. Circuito para o algoritmo de Grover**

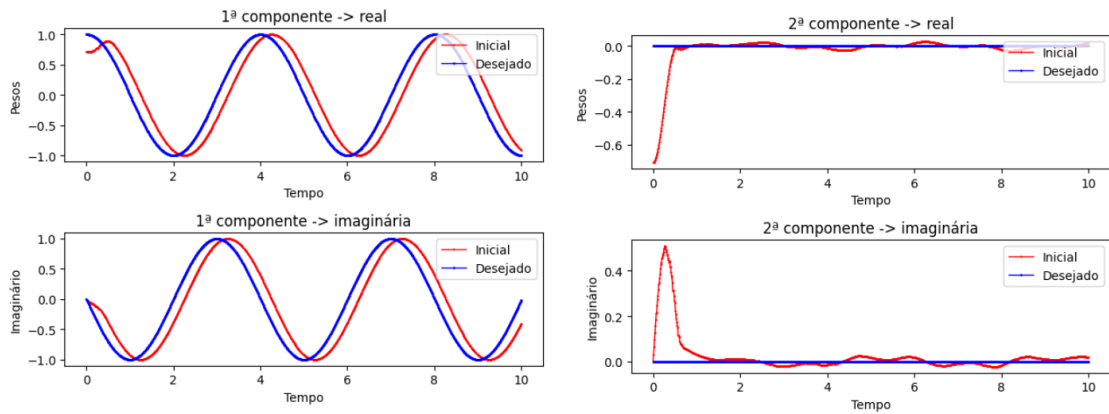
Para o primeiro caso, representado pela figura 10, pode-se interpretar o sistema como uma ação contrária a porta de Hadamard de modo a enviar o sistema para o estado 0 desde que o estado inicial fosse balanceado. Para o segundo caso, apresentado na figura 11, ocorre uma interpretação similar a porta not, visto a capacidade de inverter o conjunto de estados iniciais. O último teste, figura 12, propõe alcançar o estado 0 por meio do  $|-\rangle$ , algo não padronizado por uma porta.



**Figura 10. Componentes do primeiro teste**

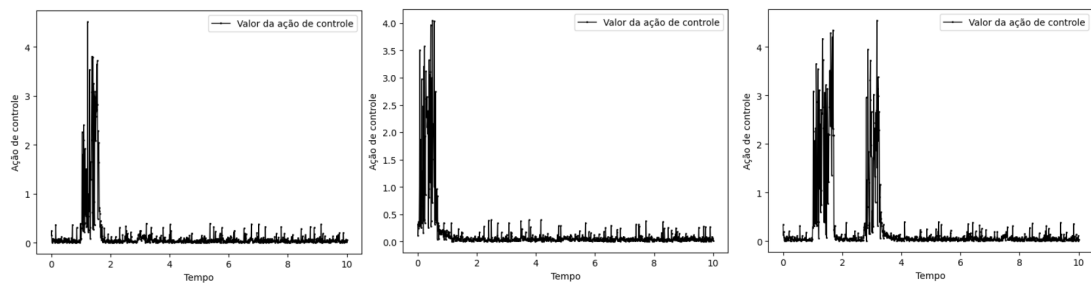


**Figura 11. Componentes do segundo teste**



**Figura 12. Componentes do terceiro teste**

Percebe-se que o sistema proposto é efetivo pois de fato consegue alcançar o estado desejado pelo usuário, além disso, ao observar a figura 13, nota-se que a ação de controle do sistema permanece inalterada quando o este alcança o seu estado desejado.



**Figura 13. Ação de controle de cada um dos testes (segundo, terceiro e primeiro teste respectivamente)**

## 5. Sugestão para próximas pesquisas

Na mesma linha deste trabalho, sugere-se a pesquisa na solução da equação a partir do primeiro método descrito por este trabalho utilizando-se das propriedades de pro-

duto tensorial de forma a melhorar a eficiência da resposta e possibilitar a simulação computacional com menor custo. Por meio desse trabalho incentiva-se também a investigação de sistemas que sofrem decoerência devido a ação externa, dessa forma, é necessário alguma base de sistemas quânticos abertos.

## 6. Conclusões

Neste trabalho foi proposta e implementada uma estratégia de controle inspirada no MPC para preparação de estado de um sistema quântico de dois níveis. O problema de otimização envolvido foi solucionado utilizando-se duas abordagens diferentes: o algoritmo genético e o gradiente conjugado. Durante o trabalho percebeu-se a necessidade de definir conceitos de mecânica quântica e de otimização para um melhor entendimento da estrutura do trabalho. Por fim, os dois algoritmos de otimização foram aplicados com sucesso e a efetividade do experimento pôde ser verificada por meio das simulações gráficas e numéricas apresentadas.

## Referências

- Alt, G. H. and Lages, F. W. (2003). Controle em tempo real de sistemas dinâmicos através de redes ip. *Instrument Society of America*.
- Bethke, D. (1978). Genetic algorithm as function optimizers. *The University of Michigan Engineering Library*.
- Bosworth, J. L., Foo, N., and Zeigler, B. P. (1972). Comparison of genetic algorithms with conjugate gradient methods.
- Camacho, E. F. and Bordons, C. (1995). *Model Predictive Control*. Springer.
- Cohen-Tannoudji, C., B., D., F., L., and J., S. (1977). *Quantum Mechanics*.
- Cunha, Pinho, and Campos (2015). O método gradiente conjugado aplicado à localização em ambientes fechados.
- D'Alessandro, D. (2021). *Introduction to quantum control and dynamics*. CRC Press.
- de Toledo Piza, A. F. R. (2001). *Mecânica Quântica*. USP, 2k+1 edition.
- Dowling, J. P. and Milburn, G. J. (2003). Quantum technology: the second quantum revolution. *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond.*, 361:1655–1674.
- Faedo, N., Iaya, S., and Ringwood, J. V. (2017). Algoritmos genéticos aplicados à solução do problema inverso biomagnético. *IFAC Journal of Systems and Control*, pages 37–56.
- Griffiths, D. F. (2012). *Mecânica Quântica*. Springer, 2a edition.
- Hashimoto, T., Yoshimoto, I., and Ohtsuka, T. (2012). A probabilistic constrained model predictive control for schrödinger equation with finite approximation.
- Jorio, A. and Frossard, J. V. (2019). *Material de estudos para mecânica quântica*. Programa de Pós-Graduação em Física UFMG.
- Lisboa, A. C. (2015). Controle quântico Ótimo: Fundamentos, aplicações e extensões da teoria.

- Otero, J. A. B. (2016). Algoritmos genéticos aplicados à solução do problema inverso biomagnético. *Dissertação de Mestrado, PUC*.
- Qin and Badgewell (2003). A survey of model predictive control technology. *Control Engineering Practice*, 11:733–764.
- Russell, S. and Norvig, P. (2013). *Inteligência Artificial*. Elsevier.
- Sakurai, J. J. (1994). *Modern Quantum Mechanics*. Pearson, revisada edition.
- Volva, D. and Mishra, P. (2023). State preparation on quantum computers via quantum steering. *quant-ph*.