

---

# Redes Neurais e Dinâmica Não-Markoviana

---

Ellen Martins Fernandes



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Uberlândia  
2022



**Ellen Martins Fernandes**

## **Redes Neurais e Dinâmica Não-Markoviana**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentada ao Programa de Graduação do Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos para a obtenção do título de Bacharel em Física.

Área de concentração: Física

Orientador: Prof. Dr. Fabrício Macedo de Souza

Uberlândia

2022



ELLEN MARTINS FERNANDES

## **REDES NEURAIS E DINÂMICA NÃO-MARKOVIANA**

Monografia final, apresentado a Universidade Federal de Uberlândia, como parte das exigências para a obtenção do título de Graduado em Física de Materiais.

Uberlândia, 19 de Agosto de 2022.

ORIENTADOR:

---

Prof. (Dr. Fabrício Macedo de Souza)  
Universidade Federal de Uberlândia

BANCA EXAMINADORA:

---

Prof. (Dr. Mauricio Foschini)  
Universidade Federal de Uberlândia

---

Prof. (Dra. Liliana Sanz)  
Universidade Federal de Uberlândia



---

# Agradecimentos

Aos cachorrinhos Fred, Sidney, Arthur, Spike e Rex que fazem ou fizeram parte da minha vida, e ao gato Zod, que habita minha casa atualmente.

Aos meus familiares que nunca duvidaram de meu potencial e sempre me apoiaram apesar de minhas escolhas não necessariamente parecerem as melhores.

À minha mãe particularmente, que sempre investiu tudo de si em mim durante todo esse tempo.

Aos meus amigos Carlos, Douglas, Gabriel, Glaucielly, Isabelle, Isaque, Letícia e Thayane, os quais sempre estiveram aqui.

À Tia Nazir, que foi a primeira professora a ter uma compreensão diferente de mim e soube adaptar-me à sala de aula.

Ao Professor Dr. Fabrício Macedo de Souza pelo suporte no pouco tempo que lhe coube, pelas suas correções e incentivos.

À Neuropsicóloga Patrícia Faria Soares que fez parte do meu processo de diagnóstico de Autismo, auxiliando em meu auto-conhecimento.

Ao acervo da Biblioteca da Universidade Federal de Uberlândia fornecendo-me uma ampla variedade de livros sobre assuntos de meu interesse desde a Física até a Filosofia de David Hume.

Aos PDFs de diversos livros e notas de aulas de física e matemática, disponíveis na internet, os quais tanto contribuíram para a minha aprendizagem, tornando o conhecimento acessível.



*"Borboletinha tá na cozinha  
fazendo chocolate  
para a madrinha  
Poti, poti  
perna de pau  
olho de vidro  
e nariz de pica-pau pau pau"  
(Mário Lúcio de Freitas)*



---

# Resumo

A Rede neural é uma poderosa ferramenta que está relacionada à aplicação de "*Machine Learning*" na resolução de problemas complexos dos quais necessitam de artifícios computacionais avançados, abrangendo diversas aplicações estendendo-se à carros autônomos, aplicações biomédicas e médicas como a descoberta de novos medicamentos, cura e diagnóstico antecipado de doenças, geração automática de notícias e classificação de estrutura de proteínas, bem como reconhecimento de padrões como o reconhecimento facial, recomendação de produtos, previsão resultados futuros como dos valores de ações na bolsa de valores e alterações climáticas até campos de engenharia de espaçonaves.

Nesse sentido, este trabalho consiste no estudo das notas de aulas de "An introduction to neural networks for beginners" e do código implementado para treinar uma Redes Neurais (RN) que reconhece dígitos escritos à mão, bem como no estudo da dinâmica não-Markoviana de sistemas quânticos bipartites na presença de reservatórios e interações de muitos corpos. Sendo utilizado o formalismo de matriz densidade e Equação mestra de *Time-Convolutionless Technique* (TCL) para descrever a dinâmica quântica de sistemas abertos. Realizando, do ponto de vista teórico, o que se chama de engenharia de reservatório, tendo em vista obter efeitos de memória na evolução temporal do sistema, em que no regime não-Markoviano busca-se fazer cálculos de emaranhamento para obter aplicações na computação quântica, tendo como inspiração o recente artigo de Banchi et al.

**Palavras-chave:** Redes Neurais. Machine Learning. Operador Matriz Densidade. TCL. Não-Markoviano .



---

# Abstract

The Neural Network is a powerful tool that is related to the application of "*Machine Learning*" in solving complex problems that require advanced computational devices, covering several applications extending to autonomous cars, biomedical and medical applications such as discovery of new drugs, cure and early diagnosis of diseases, automatic generation of news and classification of protein structure, as well as pattern recognition such as facial recognition, product recommendation, prediction of future results as well as stock values from the stock exchange and climate change to fields of spacecraft engineering.

In this sense, this work consists of the study of the lecture notes of "An introduction to neural networks for beginners" and the code implemented to train an RN that recognizes handwritten digits, as well as the study of non-Markovian dynamics of bipartite quantum systems in the presence of reservoirs and many-body interactions. The density matrix formalism and TCL are used to describe the quantum dynamics of open systems. Performing, from a theoretical point of view, what is called reservoir engineering, in order to obtain memory effects on the temporal evolution of the system, in which in the non-Markovian regime one seeks to perform entanglement calculations to obtain applications in quantum computing, inspired by the recent article by Banchi et al.

**Keywords:** Neural networks. Machine Learning. Density Hue Operator. TCL Non-Markovian .



---

## Lista de ilustrações

Figura 1 – Desenho das células neurais do cerebelo de um pombo vistas a partir da técnica de cromato de prata utilizada por Cajal, apresentando os axônios, os somas e os dendrites que constituem os neurônios.(NASCIMENTO, 2022b) . . . . .	22
Figura 2 – Representação feita em Tikz de um nó recebendo a entrada e gerando uma saída . . . . .	28
Figura 3 – Rede Neural Simples com três camadas (NASCIMENTO, 2022a). . . . .	29
Figura 4 – Representação feita em Tikz ilustrando a retropropagação, quando há apenas um nó na camada seguinte . . . . .	33
Figura 5 – Representação feita em Tikz ilustrando a retropropagação, quando há múltiplos nós na camada seguinte . . . . .	34
Figura 6 – Gráfico de mudança nos limites de integração: o <b>vermelho</b> representa os limites originais, em que $t_1$ é a variável independente, já o <b>azul</b> a troca por $t_2$ como a nova variável independente . . . . .	44
Figura 7 – Gráfico de mudança nos limites de integração: o <b>vermelho</b> representa os limites originais, em que $t_2$ é a variável independente, já o <b>azul</b> a troca por $t_3$ como a nova variável independente . . . . .	44
Figura 8 – Gráfico de mudança nos limites de integração: o <b>vermelho</b> representa os limites originais, em que $s'$ é a variável independente, já o <b>azul</b> a troca por $s''$ como a nova variável independente . . . . .	49
Figura 9 – Gráficos de mudança nos limites de integração: o <b>vermelho</b> representa os limites originais, em que $s$ é para ambos a variável independente, já o <b>azul</b> a troca por respectivamente $t_1$ e $t_2$ como a novas variáveis independentes . . . . .	51
Figura 10 – Fluxograma produzido em Tikz do algoritmo de Redes Neurais. . . . .	68
Figura 11 – Dígitos 1 gerados pelo MNIST . . . . .	69

Figura 12 – Plot da função de custo média pelo número de iterações, no qual é possível perceber que a partir de um certo valor de iterações, próximo de 500, qualquer aumento adicional não produz melhoras significativas no desempenho da rede. . . . . 73

---

## Lista de tabelas

Tabela 1 – Primeiro grupo de termos de quarta ordem . . . . .	54
Tabela 2 – Segundo grupo de termos de quarta ordem . . . . .	56
Tabela 3 – Terceiro grupo de termos de quarta ordem . . . . .	56
Tabela 4 – Quarto grupo de termos de quarta ordem . . . . .	57



---

# Lista de siglas

**RN** Redes Neurais

**TCL** Equação mestra de *Time-Convolutionless Technique*



---

# Sumário

1	INTRODUÇÃO . . . . .	21
2	REDES NEURAIIS . . . . .	27
2.1	A Estrutura da Rede Neural Artificial . . . . .	27
2.2	Nós . . . . .	28
2.3	Estrutura Básica da RN . . . . .	28
2.4	O processo de Feed-Forward . . . . .	29
2.5	Gradiente Descendente . . . . .	30
2.6	Função de Custo . . . . .	31
2.7	Gradiente Descendente em RN . . . . .	31
2.8	Retropropagação em profundidade . . . . .	32
2.9	Propagação nas Camadas Escondidas . . . . .	33
2.10	Vetorização da Retropropagação . . . . .	35
3	OPERADOR MATRIZ DENSIDADE . . . . .	37
3.1	Operador densidade para sistemas de estado puro . . . . .	37
3.2	Operador densidade para sistemas de estado misto . . . . .	39
4	TÉCNICA DE OPERADOR PROJEÇÃO . . . . .	41
4.1	A equação de Nakajima-Zwanzig . . . . .	42
4.2	Estudo da técnica TCL . . . . .	47
4.2.1	A equação mestra local no tempo . . . . .	47
4.2.2	Expansão de perturbação do gerador TCL . . . . .	48
4.3	Representação de Interação . . . . .	58
4.4	Matrizes Pauli . . . . .	59
4.5	Fórmula de Baker-Hausdorff . . . . .	62
5	IMPLEMENTAÇÃO DO GRADIENTE DESCENDENTE . . . . .	65

6	ELABORAÇÃO DO ALGORITMO DE RN . . . . .	67
7	CONCLUSÃO . . . . .	75
7.1	Trabalhos Futuros . . . . .	75
	REFERÊNCIAS . . . . .	77

---

## Introdução

Em 1888, Ramón y Cajal consegue isolar pela primeira vez as células nervosas cerebrais a partir de uma variação da técnica de coloração de Golgi, ensinada pelo neuropsiquiatra Luis Simarro Lacabra (FERNANDEZ; BREATHNACH, 2001) o qual desenvolveu uma modificação de brometo de prata da técnica de cromato de prata de Camillo Golgi (KANDEL et al., 2014).

A solução de prata é capaz de corar apenas cerca de 1% das células de qualquer região do cérebro e além disso, os que são efetivamente corados, ficam muito bem delineados desde ao corpo até a árvore dendrítica completa, como se estivessem isolados dos demais, evidenciando a ausência de continuidade citoplasmática entre neurônios (KANDEL et al., 2014). Assim, Cajal pode concluir que o sistema nervoso é composto por bilhões de neurônios distintos e que estas células se encontram polarizadas e comunicam-se por sinapses, estruturando a ideia de que o neurônio é a unidade básica do sistema nervoso (KANDEL, 2021).

Estas células individuais se organizam em circuitos cuja a forma do emaranhamento entre elas é determinante para executar funcionalidades diferentes. Além disso, pelos postulados de Cajal, devido ao princípio da *polarização dinâmica*, os sinais elétricos nas células nervosas fluem em apenas direção única, com a transmissão do impulso nervoso dos ramos protoplasmáticos (dendritos) para o corpo neuronal (soma), atingindo a expansão nervosa, isto é, a região da zona de gatilho do axônio (DELGADO-GARCÍA, 2015), e por conseguinte, pelo princípio da *especificidade conectiva*, as células nervosas não fazem conexões randômicas na formação das redes neurais, produzindo conexões específicas em pontos particulares, constituindo assim, a partir desde dois princípios, a base moderna da abordagem conexionista para o estudo do encéfalo (KANDEL et al., 2014).

Em 1943, uma publicação intitulada "*A Logical Calculus of the Ideas Immanent in Nervous Activity*" na revista *Bulletin of Mathematical Biophysics* e escritas por Walter Pitts e Warren McCulloch (MCCULLOCH; PITTS, 1943), fazia uma analogia às redes neurais biológicas o processo eletrônico, para a elaboração do primeiro modelo matemático de uma rede neural. Com isso, houve a introdução da formalização do neurônio artificial

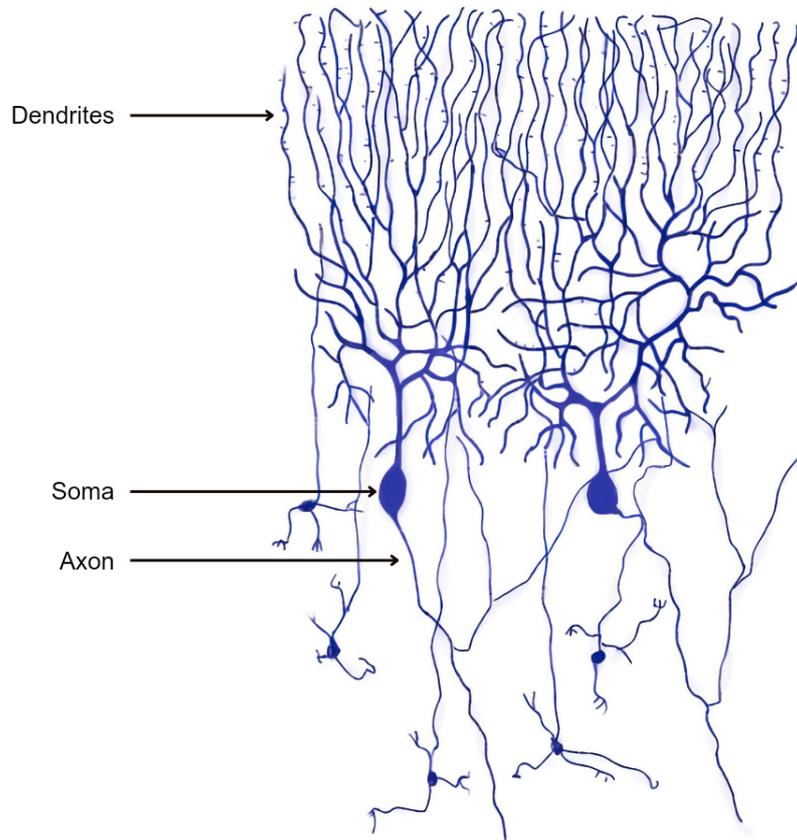


Figura 1 – Desenho das células neurais do cerebelo de um pombo vistas a partir da técnica de cromato de prata utilizada por Cajal, apresentando os axônios, os somas e os dendrites que constituem os neurônios.(NASCIMENTO, 2022b)

como a unidade básica deste modelo, propondo também a formulação teórica da atividade neural e dos processos generativos, impulsionando o estudo da ciência generativa o qual é uma área de pesquisa que explora o mundo natural e seus comportamentos complexos baseando em regras e parâmetros determinísticos e finitos para gerar um comportamento aparentemente imprevisível e infinito que reproduz e até aproxima-se de fenômenos naturais e sociais como dissertado em "*Generative Social Science Studies in Agent-Based Computational Modeling*" por Joshua M. Epstein (EPSTEIN, 2012).

Em 8 de abril de 1965, Gordon E. Moore (p.115) publicou sua observação de que "*a complexidade para componentes com custos mínimos tem aumentado em uma taxa de aproximadamente um fator de dois por ano [...]*" (MOORE, 1965), o que posteriormente passou a ser tratada como a "*Lei de Moore*" devido ao uma tendência histórica de multiplicação da quantidade de transistores no interior dos circuitos produzidos pela indústria de microchips e processadores. Nesse sentido, o constante aumento da densidade e miniaturização de transistores colide com limitações da Mecânica Clássica, pois abaixo de certas

dimensões efeitos de Mecânica Quântica são evidenciados, inviabilizando o funcionamento dos transistores, que segundo Benioff (1980), torna necessário a produção máquinas que são descrita pela mesma teoria (BENIOFF, 1980).

Na computação clássica a informação é criptografada por meio de uma representação em "0" e "1" chamada "*bits*", que possibilita o processamento da entrada e obtenção de uma saída (KNILL, 2010; SIMPSON, 2009). Este mecanismo viabiliza a execução rápida, e com boa aproximação de diversas atividades que manualmente exauriria muito tempo, como é o caso de problemas que envolvem solução numérica (FRANCO, 2006). Em análogo, na informação quântica são utilizados "*bits* quânticos" conhecidos como "*qubits*", sistemas quânticos que assumem apenas duas configurações " $|0\rangle$ " e " $|1\rangle$ " na notação de Dirac (NIELSEN; CHUANG, 2001; COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOË, 2019), correspondentes aos *bits* clássicos 0 e 1, mas com a primazia da validade do princípio de superposição, sendo assim, concede o estado do *qubit* como a combinação das duas configurações possíveis, de forma a abranger a interferência quântica (KNILL, 2010; NAKAHARA, 2008; COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOË, 2019). Assim, a entrada ("*input*") nestes dispositivos pode ser uma superposição de muitas entradas possíveis, isto é, uma sequência de estados de *qubits*, e por conseguinte, a saída ("*output*") como uma sequência de estados de *qubits* correspondente (KNILL, 2010; NAKAHARA, 2008).

No cenário atual os computadores quânticos não apresentam nenhuma vantagem sobre a versão tradicional, quanto à velocidade de processamento para sistemas no âmbito da Mecânica Clássica, por serem ao menos tão rápidos quanto os seus predecessores. Porém, no tratamento de problemas relacionados à quântica, as circunstâncias favorecem os computadores quânticos, pois são uma extensão dos computadores clássicos que explora sistemas quânticos para realizar os cálculos tornando-os mais eficientes neste âmbito (KNILL, 2010). Ademais, diferente da descrição clássica, na quântica a presença do emaranhamento, impossibilita a descrição simultânea e separada de muitos estados, cabendo apenas à descrição de um subconjunto muito pequeno de todos os estados possíveis, o que torna expressivo o poder da computação quântica por ser capaz de contornar os obstáculos da simulação de fenômenos quânticos ao manipular diretamente sistemas quânticos (KNILL, 2010; NAKAHARA, 2008).

Além disso, os computadores quânticos apresentam vantagens em velocidade de processamento em problemas de fatoração e em problemas complexos de muitas variáveis, dos quais os computadores tradicionais não resolveriam ou demandariam muitos anos para resolver, o que levou Feynman a propor a utilização de fenômenos quânticos para executar rotinas computacionais (FEYNMAN, 1982).

No contexto da computação quântica, a proposta por L. Banchi et al (BANCHI et al., 2018), mostra a possibilidade da descrição de sistemas quânticos abertos e fechados através da técnica de redes neurais artificiais, ou seja, sistemas interconectados por "nós" que funcionam como um cérebro artificial, onde a partir de um *input* a informação transita

em "camadas escondidas", que formam a rede neural, e após este caminho é obtido o *output*. Nessa técnica a dificuldade de abordar sistemas abertos, com a presença de efeitos não markovianos e não perturbativos é contornada baseando-se no funcionamento de redes neurais, preservando a simplicidade matemática da equação mestre Gorini – Kossakowski – Sudarshan – Lindblad (GKSL), isto é, a forma geral da equação markoviana mestre homogênea no tempo que descreve a evolução da matriz densidade  $\rho$ , assim é definido operadores de Lindblad com efeitos de memória para descrever a decoerência e, com isso, mapeando-a na rede neural recorrente (RNN), obtendo meios de modelar efeitos não markovianos em diferentes regimes (BANCHI et al., 2018; BREUER; PETRUCCIONE, 2007).

Sistemas não markovianos recuperam parte da informação quântica perdida para o meio ambiente devido aos efeitos de memória, de forma que a partir de um estado inicial é possível descrever toda a dinâmica (BREUER; PETRUCCIONE, 2007). Deste modo, com a nova técnica de RNN que descreve esses tipos de sistemas, é possível treinar esses modelos para realizar diversos processos em diferentes setores como: Agronegócio; Análise de Sentimento; Bioinformática; Ecologia e Meio Ambiente; Energia; Filtragem de Mensagens Indesejadas; Finanças; Mineração e Ciência de Dados Robótica; Saúde; Sistemas de Perguntas e Respostas; Sistemas de Recomendação (BANCHI et al., 2018; FACELI et al., 2011).

Para a execução de diversas atividades, o funcionamento das redes neurais artificiais reproduzem o mecanismo cerebral, em que nos dendritos do neurônio os estímulos são captados e transmitidos ao corpo, onde são processados e posteriormente um impulso é propagado pelo axônio às células vizinhas por sinapses, repetindo em várias camadas de neurônios processando a informação, podendo resultar em um comando cerebral (FERNEDA, 2006). Nesse sentido, para o estudo da evolução temporal de qubits, um input  $s_0$  propaga através de camadas intermediárias antes de chegar na camada final (output), isto é, significa que o estado  $s_{l+1}$  da camada  $l+1$  é atualizada, dado o estado  $s_l$  da  $l$ -ésima camada através da seguinte forma:

$$s_{l+1} = f(W_l s_l + w_l), \quad (1)$$

onde  $W_l$  é uma matriz peso,  $w_l$  é um vetor peso, e  $f$  uma função não-linear a ser determinada.

Esse modelo passa por um treinamento, até aprender uma relação entre input e output escondida nos dados através do RNN, em que o sistema físico pode ser descrito em termos gerais pelo Hamiltoniano:

$$H = H_S \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_S \otimes H_B + V_{SB} \quad (2)$$

onde  $H_S$  e  $H_B$  são os Hamiltonianos do sistema de qubits e do banho bosônico, respectivamente, e  $V_{SB}$  o acoplamento entre esses dois subsistemas. Sendo assim, a partir do

modelamento focado na dinâmica de sistemas quânticos abertos não markovianos usando RNN, com do aprendizado a técnica apresentada por L. Banchi et al (BANCHI et al., 2018), buscaremos estudar a aproximação entre os formalismos da mecânica quântica e da inteligência artificial e , com isso, propor uma nova técnica para se investigar o emaranhamento quântico, analisando como as redes neurais podem prever níveis de emaranhamento entre dois qubits.

O estudo de sistemas de baixa dimensionalidade como pontos quânticos, poços quânticos e sistemas moleculares apresenta grande potencialidade para a construção dos futuros dispositivos eletrônicos, pois os dispositivos eletrônicos têm diminuído constantemente para dimensões nanométricas para minimizar o consumo de energia e maximizar velocidade de processamento visto que a eletrônica e o chaveamento on/off pode ser feito com um único elétron, inflamando maior enfoque no estudo do transporte quântico (DATTA, 2005; IHN, 2010). Com isso, tais sistemas podem servir de inspiração para a implementação de *bits* quânticos em futuras implementações na computação quântica, como no artigo de Loss-Di Vincenzo (LOSS; DIVINCENZO, 1998) onde é proposto a implementação de um conjunto universal de portas de um e dois *qubits*, para realizar a computação quântica através de estados de spin eletrônico de pontos quânticos de um elétron acoplado.

Nesse sentido, mostra-se relevante estudos sobre como estabelecer o controle de todo o processo dinâmico desde a inicialização de estados, controle coerente e até a realização das medidas dos estados finais (BEREZOVSKY et al., 2006; BEREZOVSKY M. H. MIKKELSEN; COLDREN; AWSCHALOM, 2008), e que se mostra viável experimentalmente a manipulação coerente de estados quânticos de spins eletrônicos em pontos quânticos (J. et al., 2006). Tal controle pode ser obtido, por exemplo, através pulsos de tensão de porta ou de fonte-dreno, electron spin resonance (ESR) e campos ópticos coerentes (PETTA et al., 2005) . Tais experimentos demonstram a possibilidade do uso de spins eletrônicos como bits quânticos e revelam tempos de decoerência bastante animadores (chegando a ms)(BEREZOVSKY M. H. MIKKELSEN; COLDREN; AWSCHALOM, 2008; PETTA et al., 2005).

No âmbito da computação quântica, uma das principais dificuldades na implementação de qubits está no controle dos mecanismos de decoerência, pois, por exemplo, ao considerar um sistema de dois níveis em uma nanoestrutura (e.g. pontos quânticos semicondutores), seguindo a proposta de Loss-DiVincenzo (LOSS; DIVINCENZO, 1998), os *qubits* tendem a passar por processos de decoerência em razão da interação com o meio ambiente, que acaba limitando a eficiência de qualquer protocolo de informação quântica. Com isso, provocando o direcionamento das pesquisas que lidam com essa problemática, ao estudo de sistemas quânticos abertos não markoviano (BREUER; PETRUCCIONE, 2007; LIU et al., 2011; ZHANG et al., 2012; XU et al., 2015), isto é, sistemas quânticos sob efeito de memória.

Sendo assim, as redes neurais artificiais representam um método computacional que utiliza um modelo matemático que se espelha na estrutura das células nervosas cerebrais para elaborar uma espécie de inteligência artificial que aprende com a experiência. E nesse contexto, apresentaremos o operador de matriz densidade, introduzido por John von Neumann, que descreve o estado estatístico de um sistema quântico, seja ele puro ou misto, o qual é capaz de resumir em uma única matriz todo o conjunto possível de estados quânticos de um sistema físico, obtendo todas as propriedades do sistema, como o caso do valor esperado dos observáveis (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOË, 2019), para assim, introduzir o estudo da dinâmica de sistemas quânticos não-Markovianos, tendo em vista o recente artigo "*Modelling non-markovian quantum processes with recurrent neural networks*" (BANCHI et al., 2018).

---

## Redes Neurais

As Redes Neurais Artificiais são formadas por uma estrutura complexa interligada por elementos de processamento básicos conhecidos como nós. Dessa forma, constituem-se como sistemas computacionais cujos nós interconectados funcionam de maneira similar aos neurônios do cérebro, uma vez que, usando estes algoritmos, a rede artificial pode identificar padrões escondidos e correlações em dados brutos, para assim, tratá-los de maneira adequada, além de poder aprender continuamente aperfeiçoando suas funções.

Como apresentado na introdução, o primeiro conceito de Redes Neurais foi introduzido em 1943, no entanto, apenas se popularizou décadas depois com a introdução de algoritmos de treinamento como o "*backpropagation*", o qual aperfeiçoa o resultado a partir de um treinamento à posteriori (LEONARD; KRAMER, 1990).

### 2.1 A Estrutura da Rede Neural Artificial

O sistema nervoso é uma rede de neurônios, formados por núcleo celular, corpo celular (soma), dendritos, axônio e bainha de mielina. A transmissão (sinapse) de um impulso nervoso ocorre entre o axônio de um neurônio e o soma de outro. Essa sinapse de um impulso nervoso é da forma "tudo ou nada", esse estímulo necessita de uma determinada intensidade para gerar um potencial de ação conhecido como estímulo limiar, cuja a excitação deve exceder para iniciar um impulso o qual o aumento de intensidade não produz um potencial de ação mais forte, mas sim um maior número de impulsos por segundo. Assim, a partir desse ponto de excitação, o potencial de ação gerado na membrana estimulada propaga-se à área vizinha, provocando sucessivas despolarizações e repolarizações ao longo da membrana neuronal, por conseguinte, o impulso é propagado para todas as partes do neurônio em um sentido único, dos dendritos ao axônio (KANDEL et al., 2014; MCCULLOCH; PITTS, 1943).

Nesse contexto, introduziremos a função de ativação, que deve mudar o estado da

saída quando a entrada é maior que um determinado valor, simulando a sinapse nervosa:

$$f(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \quad (3)$$

isto é, a função sigmóide.

## 2.2 Nós

As interconecções neurais funcionam como "nós" que vinculam um neurônio a outro resultando em uma reação em cadeia que estende por diversas camadas quando ocorrem sinapses. As saídas dos neurônios da primeira camada são recebidas por cada neurônio da camada seguinte na forma de uma entrada dada pela média ponderada que este reprocessa gerando uma nova saída.

Podemos ilustrar o nó como um círculo, que recebe a entrada ponderada e em seguida aplica a função de ativação processando a informação gerando uma nova saída  $h_{w,b}(x)$ , como no diagrama a seguir (THOMAS, 2017):

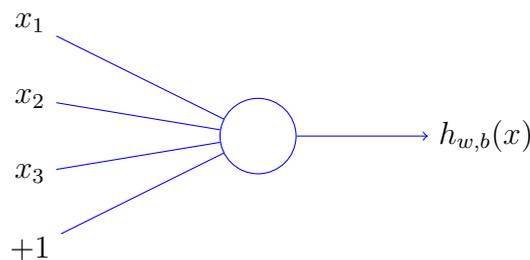


Figura 2 – Representação feita em Tikz de um nó recebendo a entrada e gerando uma saída

onde  $h_{w,b} = f(x_1w_1 + x_2w_2 + x_3w_3 + b)$ , sendo os valores de  $w_i$  os pesos que alteram durante o processo de aprendizagem, enquanto  $b$  o peso do elemento de polarização  $+1$ , cuja função é aumentar a flexibilidade do nó.

## 2.3 Estrutura Básica da RN

Em uma RN existe uma quantidade enorme de interconecções, o encéfalo humano possui da ordem de  $10^{11}$  neurônios, que podem ser classificados em, no mínimo, mil diferentes tipos (KANDEL et al., 2014), mas a estrutura de RN simplificada consiste em uma camada de entrada, uma camada oculta e uma camada de saída ("*output*") como ilustrado na Figura 3.

Nessa ilustração a primeira camada representa a camada de entrada, na qual os dados de entrada externos são integrados à rede, a segunda camada representa a camada oculta, pois essa camada não é acessível diretamente, em geral, as redes neurais têm muitas

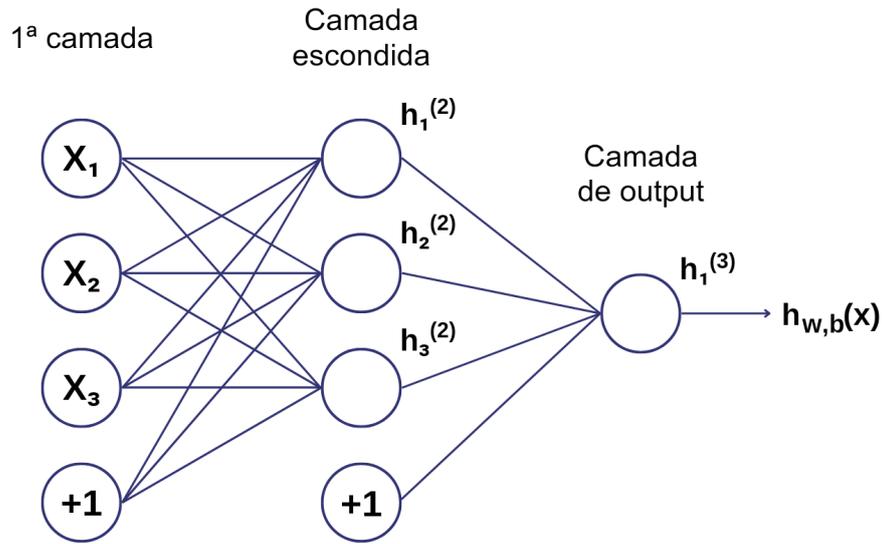


Figura 3 – Rede Neural Simples com três camadas (NASCIMENTO, 2022a).

camadas como essa, enquanto a terceira camada representa a camada de saída, na qual obtém-se o resultado do processamento final. Cada nó na camada oculta ilustrada tem interconecções com todos os nós da camada anterior associados a pesos próprios que são característicos de cada conexão (THOMAS, 2017).

## 2.4 O processo de Feed-Forward

Para o caso exemplificado na Figura 3, a descrição do processo de cálculo do mecanismo de RN artificial ocorrido é:

$$h_1^{(2)} = f(w_{11}^{(1)}x_1 + w_{12}^{(1)}x_2 + w_{13}^{(1)}x_3 + b_1^{(1)}) \quad (4)$$

$$h_2^{(2)} = f(w_{21}^{(1)}x_1 + w_{22}^{(1)}x_2 + w_{23}^{(1)}x_3 + b_2^{(1)}) \quad (5)$$

$$h_3^{(2)} = f(w_{31}^{(1)}x_1 + w_{32}^{(1)}x_2 + w_{33}^{(1)}x_3 + b_3^{(1)}) \quad (6)$$

$$h_{w,b}^{(2)} = h_1^{(3)} = f(w_{11}^{(2)}h_1^{(2)} + w_{12}^{(2)}h_2^{(2)} + w_{13}^{(2)}h_3^{(2)} + b_1^{(2)}) \quad (7)$$

onde no peso do nó  $w_{ij}^{(l)}$  e do bias  $b_i^{(l)}$ ,  $l$  refere-se ao número da camada a qual o pertencem,  $i$  refere-se ao número do nó da conexão com a camada  $l + 1$  e  $j$  refere-se ao número do nó da conexão com a camada  $l$ , enquanto,  $x_j$  e  $h_j^{(l)}$  são respectivamente as entradas e as saídas de cada nó, constituindo o processo de *Feed-Forward* (THOMAS, 2017).

Para obter otimizações computacionais, é possível escrever as equações anteriores na forma compacta utilizando a vetorização com a introdução da variável  $z_i^{(l)}$  como entrada

somada de cada nó  $l$  da camada  $l$  incluindo o termo de polarização:

$$z_i^{(l+1)} = \sum_{j=1}^n w_{ij}^{(l)} x_j + b_i^{(l)}, \quad (8)$$

onde  $n$  é o número de nós na camada  $l$ .

Deste modo, o exemplo da Figura 3 na forma matricial é reduzido em:

$$z^{(2)} = W^{(1)}x + b^{(1)} \quad (9)$$

$$h^{(2)} = f(z^{(2)}) \quad (10)$$

$$z^{(3)} = W^{(2)}h^{(2)} + b^{(2)} \quad (11)$$

$$h_{W,b}(x) = h^{(3)} = f(z^{(3)}), \quad (12)$$

onde todos os elementos passam a ter forma de matriz ou vetores.

Cuja generalização tem a forma:

$$z^{(l+1)} = W^{(l)}h^{(l)} + b^{(l)} \quad (13)$$

$$h^{(l+1)} = f(z^{(l+1)}), \quad (14)$$

que através das rotinas algébricas na linguagem de programação Python, a implementação é otimizada como uma alternativa aos loops os qual este tipo de estrutura direciona.

## 2.5 Gradiente Descendente

Para realizar a aprendizagem supervisionada o ajuste dos valores dos pesos que ligam as camadas de rede devem minimizar o erro. Com isso, no aperfeiçoamento da RN para prever resultados corretos se introduz o conceito de gradiente descendente.

A partir de uma inicialização aleatória neste processo é obtido os  $w_{ij}$  cujo erro é minimizado utilizando o gradiente da curva de erro em cada ponto calculado. Pois pelo gradiente obtêm-se informações direcionais: ao ser positivo em relação a um aumento em  $w$ , sugere que um passo nessa direção aumenta o erro; ao ser negativo em relação a um aumento de  $w$ , o indicativo é oposto pois o erro é minimizado. Envolvendo múltiplos passos até a obtenção do menor erro possível, dado um critério de parada, isto é, o processo é interrompido devido a alguma condição de parada estabelecida, como quando o erro  $\nabla_{erro}$  cai abaixo de um determinado limite conhecido como precisão, atualizando  $w$  de acordo com (THOMAS, 2017):

$$w_{novo} = w_{antigo} - \alpha \nabla_{erro} \quad (15)$$

onde o  $w_{novo}$  é o peso atualizado,  $w_{antigo}$  o peso do passo anterior,  $\nabla_{erro}$  o gradiente do erro em  $w_{antigo}$  e  $\alpha$  o tamanho do passo o qual é elementar neste processo, pois ele determina a rapidez com a qual a solução converge no erro mínimo, sendo necessário o seu ajustado em um valor pequeno o suficiente para que a otimização de  $w$  possa convergir par algum valor.

## 2.6 Função de Custo

Ao minimizar iterativamente o erro da saída da rede neural variando os pesos na descida do gradiente, surge o problema do "*overfitting*" (sobreajuste) que ocorre quando um modelo estatístico se ajusta ao conjunto de dados anteriormente observado, mas é ineficaz para prever novos resultados, representando um problema ao aprendizado de máquina. Para contornar esta adversidade, a *função de custo* se apresenta como uma formula mais geral para a minimização do erro ao mesmo tempo em que evita a ocorrência de "*overfitting*", a qual para o treinamento da RN é em um par de treinamento  $(x^z, y^z)$ :

$$J(w, b, x, y) = \frac{1}{2} \|y^z - h^{(n_i)}(x^z)\|^2 \quad (16)$$

$$= \frac{1}{2} \|y^z - y_{pred}(x^z)\|^2 \quad (17)$$

como a função de custo do  $z^{\text{ésimo}}$  treino, onde  $h^{(n_i)}$  é a saída da camada final da rede neural e  $y_{pred}$  para a predição da rede neural dado  $x^z$ , enquanto a norma representa uma forma muito comum na representação do erro no aprendizado de máquina e a constante  $\frac{1}{2}$  é adicionada em razão da diferencial aplicada a função de custo que surge na "*backpropagation*" (retropropagação) a qual será discutida adiante.

A qual aplicada a todos os  $m$  pares de treinamento:

$$J(w, b) = \frac{1}{m} \sum_{z=0}^m \frac{1}{2} \|y^z - h^{(n_i)}(x^z)\|^2 \quad (18)$$

$$= \frac{1}{m} \sum_{z=0}^m J(W, b, x^{(z)}, y^{(z)}) \quad (19)$$

resultando no erro quadrático médio mínimo sobre todas as amostras de treinamento.

## 2.7 Gradiente Descendente em RN

Para utilizar a função de custo no treinamento dos pesos da rede é preciso retornar ao gradiente descendente e adicionar a retropropagação. Nesse contexto, o gradiente descendente de cada peso  $w_{ij}^{(l)}$  e bias  $b_i^{(l)}$  tem a forma:

$$w_{ij}^{(l)} = w_{ij}^{(l)} - \alpha \frac{\partial}{\partial w_{ij}^{(l)}} J(w, b) \quad (20)$$

$$b_i^{(l)} = b_i^{(l)} - \alpha \frac{\partial}{\partial b_i^{(l)}} J(w, b) \quad (21)$$

analogamente à equação (15), onde os pesos são atualizado a cada processo de interação, mas agora com a adição da função de custo, restando então, a apresentação do "*backpropagation*".

## 2.8 Retropropagação em profundidade

Na inicialização da Rede Neural os pesos sinápticos recebem valores aleatórios, os quais multiplicados pelos valores recebidos da camada mais externa nem sempre atingem os valores desejados durante o treinamento. Nesse sentido, a correção dos pesos sinápticos pode ser obtida através do algoritmo de "*backpropagation*", que é feito pelo ajuste a partir da diferença entre o valor obtido e o valor esperado, propagando a correção para todas as células nervosas.

O algoritmo "*backpropagation*", também conhecido como modo reverso de diferenciação automática para redes neurais multicamadas, foi inicialmente introduzido por Rumelhart em um artigo publicado na Nature (RUMELHART; HINTON; WILLIAMS, 1986) o qual mostrou que por meio de experimentos que estas redes são capazes de prender representações internas úteis de dados, possibilitando o treinamento das Redes Neurais com diversas camadas através da retropropagação.

Este processo de adequação dos pesos é dividido em duas partes, a primeira delas consiste no "*feed-forward*", o qual é introduzido um valor na camada de entrada (*input*) e outro na camada de saída (*output*) e esse resultado flui pelas camadas internas até ser reproduzido a resposta no *output*, e por fim, o "*backpropagation*", onde ocorre o aprendizado da rede, neste processo, o valor obtido é comparado com o valor desejado, e com isso, a rede calcula o erro e propaga a correção as demais camadas internas até a entrada, enquanto ajusta os pesos sinápticos até que o resultado tenha a exatidão desejada.

Retomando o "*feed-forward*" para o exemplo inicial de três camadas, podemos encontrar o quanto a variação do peso  $w_{12}^{(2)}$  afeta a função de custo  $J$ , isto é,

$$\frac{\partial J}{\partial w_{12}^{(2)}} = \frac{\partial J}{\partial h_1^{(3)}} \frac{\partial h_1^{(3)}}{\partial z_1^{(2)}} \frac{\partial z_1^{(2)}}{\partial w_{12}^{(2)}} \quad (22)$$

pela derivada em camadas na regra da cadeia, cuja última derivada parcial  $\frac{\partial z_1^{(2)}}{\partial w_{12}^{(2)}}$ , reduz-se à  $h_2^{(2)}$ , enquanto a penúltima à

$$\frac{\partial h}{\partial z} = f'(z) = f(z)(1 - f(z)), \quad (23)$$

por se tratar da derivada da função de ativação.

Restando apenas a derivada parcial da função de custo  $J(w, b, x, y) = \frac{1}{2} \|y_1 - h_1^{(3)}(z_1^{(2)})\|^2$  com relação à  $h_1^{(3)}$ , a qual pode ser solucionada pela substituição simples de

$$u = \|y_1 - h_1^{(3)}(z_1^{(2)})\|, \quad (24)$$

com isso,

$$J = \frac{1}{2} u^2 \quad (25)$$

$$\frac{\partial J}{\partial h} = \frac{\partial J}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial h} = -(y_1 - h_1^{(3)}), \quad (26)$$

que pode ser generalizado para todos os pesos introduzindo a notação  $\delta$

$$\delta_i^{(n_i)} = -(y_i - h_i^{(n_i)}) f'(z_i^{(n_i)}) \quad (27)$$

onde  $i$  denota o número do nó na camada de saída. Com isso, a variação da função de custo com o peso é dada na forma geral por:

$$\frac{\partial}{\partial w_{ij}^{(l)}} J(w, b, x, y) = h_j^{(l)} \delta_i^{(l+1)} \quad (28)$$

## 2.9 Propagação nas Camadas Escondidas

Pelo método de retropropagação é possível encontrar a variação na função de custo de para pesos nas camadas escondidas, isto é, as camadas que não pertencem ao input e ao output. A partir dos pesos que conectam o output a função de custo pode ser calculada diretamente comparando a camada de saída com os dados do treinamento, enquanto as camadas mais internas a função de custo é conectada indiretamente por meio de pesos mediadores, que por conseguinte, são conectados à outras camadas de nós através de outros pesos mediadores.

O termo  $\delta_i^{(n_i)}$  representa a conexão final da rede com a função de custo, que por conseguinte, deve-se propagar de volta pela rede. Neste sentido, podemos tomar do exemplo inicial o nó  $j$  da segunda camada e avaliar como o termo em questão contribui na rede de teste através do peso  $w_{ij}^{(2)}$

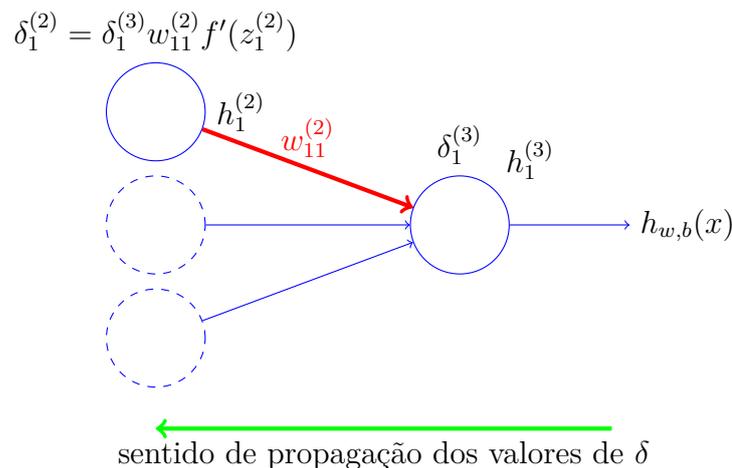


Figura 4 – Representação feita em Tikz ilustrando a retropropagação, quando há apenas um nó na camada seguinte

em que para o caso em questão onde há apenas um nó na camada de saída, a generalização da camada oculta tem a forma:

$$\delta_j^{(l)} = \delta_1^{(l+1)} w_{ij}^l f'(z_j^{(l)}). \quad (29)$$

Enquanto, para o caso onde há múltiplos nós na camada do "output", podemos estender a generalização, a partir da soma ponderada de todos os erros comunicados e assim obter  $\delta_j^{(l)}$ , como mostrado no diagrama a seguir:

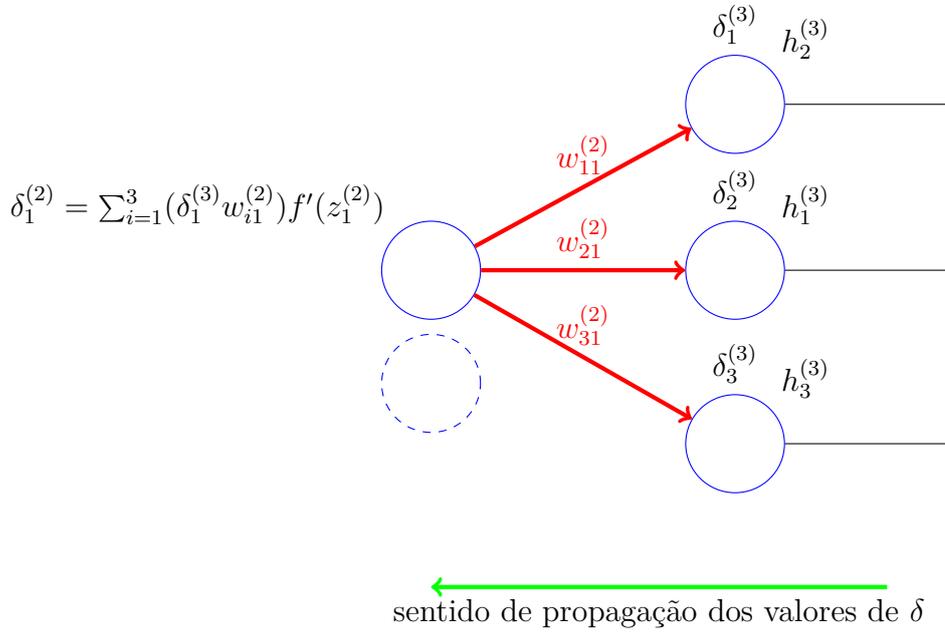


Figura 5 – Representação feita em Tikz ilustrando a retropropagação, quando há múltiplos nós na camada seguinte

cuja generalização tem a forma

$$\delta_j^{(l)} = \left( \sum_{i=1}^{s^{(l+1)}} w_{ij}^{(l)} \delta_i^{(l+1)} \right) f'(z_j^l), \quad (30)$$

onde o valor  $s^{(l+1)}$  é o número de nós na camada  $(l+1)$  e a derivada da função de ativação é multiplicada pela somatório de outro gradiente local, que provém da retropropagação dos neurônios posteriores ao  $j$ , ou seja, do neurônio  $i$  vezes os pesos sinápticos  $w_{ij}$  entre eles.

Com isso, obtém-se a expressão para a equação que resulta nos gradientes locais de neurônios internos, isto é, escondidos na rede, de modo que conhecendo a forma de  $\delta$ , é possível calcular as derivadas da função de custo expressas por:

$$\frac{\partial}{\partial w_{ij}} J(w, b, x, y) = h_j \delta_i^{(l+1)} \quad (31)$$

$$\frac{\partial}{\partial b_i^{(l)}} J(w, b, x, y) = \delta_i^{(l+1)} \quad (32)$$

e por conseguinte, aplicar o gradiente descendente descrito pelas equações (20) e (21).

## 2.10 Vetorização da Retropropagação

Assim como feito na seção 2.4, para escapar do uso de loops dentro de loops e obter otimizações computacionais a vetorização mostra-se como uma alternativa para a realização deste tipo de cálculo, resultando em

$$\frac{\partial}{\partial W^{(l)}} J = \delta^{(l+1)} (h^{(l)})^T \quad (33)$$

$$\frac{\partial}{\partial b^{(l)}} J = \delta^{(l+1)} \quad (34)$$

onde os vetores  $h^{(l)}$  e  $\delta^{(l+1)}$  tem respectivamente dimensões de  $(s_l \times \mathbb{1})$  e de  $(s_{l+1} \times \mathbb{1})$ , resultando na dimensão correta da matriz  $W^{(l)}$  de  $(s_{l+1} \times s_l)$  na equação (33) e do vetor  $b^{(l)}$  de  $(s_{l+1} \times \mathbb{1})$  na (34), que pela adição ponderada dos erros durante a realização do *backpropagation*:

$$\delta_j^{(l)} = \left( \sum_{i=1}^{s_{l+1}} w_{ij} \delta_i^{(l)} \delta_i^{(l+1)} \right) f'(z_j^{(l)}) \quad (35)$$

$$= ((W^{(l)})^T \delta^{(l+1)}) \cdot f'(z^{(l)}) \quad (36)$$

onde  $\cdot$  simboliza o produto de Hadamard, isto é, a multiplicação elemento-por-elemento.



## Operador matriz densidade

A descrição quântica dos sistemas em que os estados não são bem determinados cria dificuldades devido a informação incompleta sobre o objeto de estudo. Nestas condições, torna-se necessário o uso do *operador matriz densidade*, pois este une postulados da mecânica quântica com resultados de cálculos probabilísticos, os quais são inseridos devido a indeterminação do sistema. De modo que em tais circunstâncias o estado deste sistema pode ser escrito como uma mistura probabilística de vários estados, cada qual com uma probabilidade de ocorrer:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_0^k c_k(t) |u_k\rangle \quad (37)$$

em que  $\sum_k |c_k(t)|^2 = 1$ .

Assim, desde que os estados  $|\psi_k(t)\rangle$  sejam ortornormais, isto é, os vetores  $|\psi_k(t)\rangle$  sejam mutuamente ortogonais e normalizados, a probabilidade de se encontrar o conjunto de autovalores associados à  $|\psi_k(t)\rangle$  é  $|c_k(t)|^2$ .

Nesse sentido, o estudo do comportamento de uma mistura estatística pode ser feito a partir do cálculo de predições físicas de possíveis estados, o que é demasiado complicado. Em contrapartida, pelo resgate da equação (1), é apresentada uma associação de médias de vetores auto-estados do sistema, criando a possibilidade de pensarmos na existência de um '*operador de média*', o qual seria capaz de fazer uma descrição simplificada de misturas estatísticas, contornando a anterior adversidade.

### 3.1 Operador densidade para sistemas de estado puro

A título de facilitar a discussão sobre operador densidade partiremos do estudo de sistemas de estados puros, isto é, todas as propabilidades de estado são zero com exceção de uma delas, após isso, exploraremos os mistos.

Para a construção do operador desejado, devemos pontuar que para um dado obser-

vável  $A$ :

$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \sum_{n,p} \langle u_n | c_n^*(t) A c_p(t) | u_p \rangle \quad (38)$$

$$= \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) \langle u_n | A | u_p \rangle \quad (39)$$

$$= \sum_{n,p} c_n^*(t) c_p(t) A_{np} \quad (40)$$

E a evolução temporal de  $|\psi(t)\rangle$  segundo a equação de Schrödinger, é dado por:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (41)$$

em que  $H(t)$  é o Hamiltoniano do sistema e

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | H(t) \quad (42)$$

é o complexo conjugado.

De modo análogo, podemos obter:

$$\langle u_p | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | u_n \rangle = \langle u_p | c_p | u_p \rangle \langle u_n | c_n^* | u_n \rangle \quad (43)$$

$$= c_n^*(t) c_p(t) \quad (44)$$

e assim definir  $\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$  como o operador densidade, o qual nos permite caracterizar o estado quântico do sistema.

Observe que agora podemos reescrever algumas das equações anteriores em termos de  $\rho(t)$ :

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = \sum_n \langle u_n | c_n^* c_n | u_n \rangle = \sum_n \rho_{nn}(t) \quad (45)$$

que como podemos ver, os elementos da soma são todos da diagonal, isto é, equivalem ao cálculo do traço da matriz  $\rho$ ,

$$\sum_n \rho_{nn}(t) = \text{tr}\{\rho\} = 1, \quad (46)$$

que expressa a conservação da probabilidade.

Também calcular o valor do observável,

$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \sum_{n,p} \rho_{pn}(t) A_{pn} \quad (47)$$

$$= \sum_{n,p} \langle u_n | \rho(t) \delta_{pn} A | u_p \rangle \quad (48)$$

$$= \sum_p \langle u_p | \rho(t) A | u_p \rangle \quad (49)$$

$$= \text{tr}\{\rho(t) A\} \quad (50)$$

bem como, da equação de Schrödinger extrair

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = H(t) |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \quad (51)$$

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \frac{d}{dt} \langle \psi(t)| = \frac{H(t)}{i\hbar} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \quad (52)$$

$$\frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + \frac{1}{-i\hbar} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H(t) = \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)]. \quad (53)$$

Outra observação interessante é que para operadores de estados puros, como representado por  $\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$ , teremos sempre:

$$\rho^\dagger(t) = (|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|)^\dagger = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = \rho(t) \quad (54)$$

$$\rho^2(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = \rho(t) \quad (55)$$

$$\text{tr}\{\rho^2(t)\} = \text{tr}\{\rho(t).\rho(t)\} = \text{tr}\{\rho(t)\} = 1 \quad (56)$$

que das duas ultimas relações podemos perceber que  $\rho(t)$  tem propriedades de operador projetor, que como verificaremos mais adiante é válida para apenas estados puros.

## 3.2 Operador densidade para sistemas de estado misto

Quanto aos sistemas de estados de mistura estatística, a definição de operador densidade sofrerá modificações em adequação às condições do problema, pois agora existem diversas contribuições de  $p_k$ , cada qual com peso diferente, de forma que sempre:

$$\sum_k p_k = 1 \quad (57)$$

em que  $0 \leq p_1, p_2, \dots, p_k, \dots \leq 1$ .

Para o cálculo da probabilidade  $\mathcal{P}_k(a_n)$  da medida do observável  $A$  ser  $a_n$ , dado um certo estado  $|\psi_k\rangle$ , fazemos a seguinte operação:

$$\mathcal{P}_k(a_n) = \langle \psi_k | P_n | \psi_k \rangle. \quad (58)$$

Portanto, para obtermos o probabilidade geral, isto é, o somatório de todas as contribuições de pesos  $\mathcal{P}_k(a_n)$  relativos a algum  $p_k$  dessa mistura estatística, efetuamos:

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_k p_k \mathcal{P}_k(a_n), \quad (59)$$

e analogamente à equação (50),

$$\mathcal{P}_k(a_n) = \text{tr}\{\rho_k P_n\}, \quad (60)$$

de modo que um unitário  $\rho_k$  assume o mesmo resultado que para o caso de um estado puro, ou seja,

$$\rho_k = |\psi_k\rangle \langle \psi_k|. \quad (61)$$

Aqui esse resultado é referente ao valor de  $\rho_k$  para apenas um dos estado da mistura estatística estudada. Agora para que sejamos capazes de descrever o operador de densidade total do sistema, devemos somar todas as contribuições  $\rho_k$  relativos ao peso de cada um deles, ou seja,

$$\rho = \sum_k p_k \rho_k. \quad (62)$$

Definido o  $\rho$  para misturas estatísticas podemos estudar suas propriedades, como o traço:

$$\text{tr}\{\rho\} = \text{tr}\left\{\sum_k p_k \rho_k\right\} = \sum_k p_k \text{tr}\{\rho_k\} = \sum_k p_k = 1, \quad (63)$$

pois o  $\text{tr}\{\rho_k\} = 1$  para cada contribuição, pela mesma razão que o traço era igual a 1 para um estado puro.

Nesta situação, estamos fazendo o somatório  $k$  estados, cada qual com um peso na formulação do  $\rho$ , além disso, como o traço de cada  $\rho_k$  é 1 e a soma de todas as contibuições também é 1, é intuitivo imaginar que para misturas estatística o traço total também é igual a 1, assim como para estados puros.

Quanto ao valor do observável podemos substituir a equação (60) na (59), para obter  $\mathcal{P}(a_n) = \text{tr}\{\rho P_n\}$  e generalizar o caso de estado puro para misto, escrevendo o valor observável como uma soma de contribuições.

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n \mathcal{P}(a_n) = \sum_n a_n \text{tr}\{\rho P_n\} = \text{tr}\left\{\rho \sum_n a_n P_n\right\} = \text{tr}\{\rho A\}. \quad (64)$$

Já a evolução temporal do operador densidade, pode ser descrita pela equação de Schrödinger, análogo a equação (56):

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_k = [H(t), \rho_k(t)] \quad (65)$$

para cada valor  $\rho_k$ .

Por fim, devemos ressaltar algumas exceções para estados mistos, tais como:

$$\rho^2 = \left(\sum_k p_k \rho_k\right) \left(\sum_k p_k \rho_k\right) \quad (66)$$

$$= \sum_k p_k^2 \rho_k \rho_k \quad (67)$$

$$= \sum_k p_k^2 |\psi_k\rangle \langle \psi_k | \psi_k\rangle \langle \psi_k | \quad (68)$$

$$= \sum_k p_k^2 |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \neq \rho \quad (69)$$

e

$$\text{tr}\{\rho^2\} = \text{tr}\left\{\sum_k p_k^2 \rho_k \rho_k\right\} = \sum_k p_k^2 \text{tr}\{\rho_k\} = \sum_k p_k^2 \leq 1. \quad (70)$$

Consolidada esta discussão sobre o operador densidade para estados puros e mistos, podemos iniciar o estudo da *técnica de operador projeção*.

## Técnica de operador projeção

Esta técnica de operador é utilizada para tratar problemas envolvendo de dinâmica não-Markoviana, mais especificamente no tratamento das soluções integrais de Nakagima-Zwanzig. Então, retomando a notação já utilizada na introdução, consideraremos o acoplamento entre um  $S$  aberto e  $R$ , um operador densidade especificado por um hamiltoniano  $H = H_o + \alpha H_I$ , em que  $\alpha$  é um parâmetro de expansão adimensional, o qual nos fornece o grau do acoplamento e  $H_I(t) = e^{iH_o t} H_I e^{-iH_o t}$ .

Retomaremos a equação (65), fazendo  $\hbar = 1$ , de modo que obtém-se a equação de *Liouville-von Neumann*:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i\alpha [H(t), \rho(t)] \equiv \alpha \mathcal{L}(t)\rho(t) \quad (71)$$

em que  $\mathcal{L}(t)$  é o super operador de Liouville.

Usaremos a técnica para encontrar uma equação exata de movimento para o operador de densidade do sistema  $\rho_s$ , neste caso definimos o super-operador  $\mathcal{P}$  como  $\rho \mapsto \mathcal{P}\rho = \text{tr}_R \{\rho\} \rho_R \equiv \rho_S \oplus \rho_R$  em que  $\rho_R$  é algum estado fixo do reservatório. Isto é, o super-operador definido projeta sobre a parte relevante de  $\rho$ , de modo que  $\mathcal{P}\rho$  nos fornece a informação completa desejada, o que permite-nos reconstruir a matriz densidade reduzida  $\rho_S$ .

A título de complementariedade, podemos criar um outro super-operador que satisfaça  $\rho = \mathcal{P}\rho + \mathcal{X}$ , ou seja:

$$\rho - \mathcal{P}\rho = \mathcal{X} = \mathcal{Q}\rho \quad (72)$$

em que  $\mathcal{Q}\rho$  projeta sobre a parte irrelevante.

Dessa forma, os super-operadores  $\mathcal{P}$  e  $\mathcal{Q}$  são mapas de um espaço euclidiano no qual as variáveis nos eixos referem-se a estados (espaço de estado). Note que este espaço e o resultado de uma combinação do sistema com o reservatório, assim o espaço de Hilbert

total é dado por  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \oplus \mathcal{H}_R$ , em que é válida as seguintes propriedades

$$\mathcal{P} + \mathcal{Q} = \mathbb{1}, \quad (73)$$

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}, \quad (74)$$

$$\mathcal{Q}^2 = \mathcal{Q}, \quad (75)$$

$$\mathcal{P}\mathcal{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{P} = 0, \quad (76)$$

para  $\text{tr}_R \{\rho_R\} = 1$ .

Neste estudo, a escolha adequada de  $\rho_R$  é fortemente dependente da específica aplicação, como para um caso estacionário, o qual para alguns casos pode-se assumir que os momentos ímpares da interação Hamiltoniana com respeito á estados de referência desapareçam

$$\text{tr}_R \{H_I(t_1)H_I(t_2)\dots H_I(t_{2n+1})\rho_R\} = 0, \quad (77)$$

disso segue,

$$\mathcal{P}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{L}(t_2)\dots\mathcal{L}(t_{2n+1})\mathcal{P} = 0. \quad (78)$$

## 4.1 A equação de Nakajima-Zwanzig

Como neste projeto o interesse principal é o estudo da dinâmica de um sistema  $S$  aberto, é feito a aplicação do operador  $\mathcal{P}$  e  $\mathcal{Q}$  na equação (71) de forma a obter-se duas expressões, a primeira com  $\mathcal{P}\rho(t)$  e a segunda com  $\mathcal{Q}\rho(t)$  para manipular a equação de interesse a fim de obter a equação de *Nakajima-Zwanzig*, observe:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{P}\rho(t) = \mathcal{P}\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = \alpha\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\rho(t) \quad (79)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{Q}\rho(t) = \mathcal{Q}\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = \alpha\mathcal{Q}\mathcal{L}(t)\rho(t) \quad (80)$$

Que pela equação (73),

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{P}\rho(t) = \alpha\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{I}\rho(t) = \alpha\mathcal{Q}\mathcal{L}(\mathcal{P} + \mathcal{Q})\rho(t) \quad (81)$$

$$= \alpha\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{P}\rho(t) + \alpha\mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathcal{Q}\rho(t) \quad (82)$$

analogamente,

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{Q}\rho(t) = \alpha\mathcal{Q}\mathcal{L}(t)\mathcal{P}\rho(t) + \alpha\mathcal{Q}\mathcal{L}(t)\mathcal{Q}\rho(t). \quad (83)$$

Assim, resolvendo a equação (83) para substituir na (82):

$$\mathcal{Q}\rho(t) = \mathcal{Q}\rho(t_0) + \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{P}\rho(t_1)dt_1 + \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{Q}\rho(t_1)dt_1, \quad (84)$$

note que,

$$\mathcal{Q}\rho(t_1) = \mathcal{Q}\rho(t_0) + \alpha \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)\mathcal{P}\rho(t_2)dt_2 + \alpha \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)\mathcal{Q}\rho(t_2)dt_2 \quad (85)$$

logo,

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}\rho(t) &= \mathcal{Q}\rho(t_0) + \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{P}\rho(t_1)dt_1 \\ &+ \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1) \left[ \mathcal{Q}\rho(t_0) + \alpha \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)\mathcal{P}\rho(t_2)dt_2 + \alpha \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)\mathcal{Q}\rho(t_2)dt_2 \right] dt_1 \end{aligned} \quad (86)$$

$$\begin{aligned} &= \mathcal{Q}\rho(t_0) + \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{P}\rho(t_1)dt_1 + \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{Q}\rho(t_0)dt_1 \\ &+ \alpha^2 \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)\mathcal{P}\rho(t_2)dt_2dt_1 + \alpha^2 \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)\mathcal{Q}\rho(t_2)dt_2dt_1 \end{aligned} \quad (87)$$

$$\begin{aligned} &= \mathcal{Q}\rho(t_0) + \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{P}\rho(t_1)dt_1 + \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{Q}\rho(t_0)dt_1 \\ &+ \alpha^2 \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)\mathcal{P}\rho(t_2)dt_2dt_1 + \alpha^2 \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2) [\mathcal{Q}\rho(t_0) \\ &+ \alpha \int_{t_0}^{t_2} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_3)\mathcal{P}\rho(t_3)dt_3 + \alpha \int_{t_0}^{t_2} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_3)\mathcal{Q}\rho(t_3)dt_3] dt_2dt_1 \end{aligned} \quad (88)$$

$$\begin{aligned} &= \mathcal{Q}\rho(t_0) + \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{P}\rho(t_1)dt_1 + \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)\mathcal{Q}\rho(t_0)dt_1 \\ &+ \alpha^2 \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)\mathcal{P}\rho(t_2)dt_2 + \alpha^2 \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)\mathcal{Q}\rho(t_0)dt_2 \\ &+ \alpha^3 \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)dt_2 \int_{t_0}^{t_2} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_3)\mathcal{P}\rho(t_3)dt_3 \\ &+ \alpha^3 \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)dt_2 \int_{t_0}^{t_2} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_3)\mathcal{Q}\rho(t_3)dt_3 \end{aligned} \quad (89)$$

$$= \left[ 1 + \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)dt_1 + \alpha^2 \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1)dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2)dt_2 + \dots \right] \mathcal{Q}\rho(0) + \mathcal{R}(t) \quad (90)$$

em que  $\mathcal{R}(t)$  representa todos os demais termos não dependentes de  $\mathcal{Q}\rho(0)$ .

Usando a notação  $\mathcal{L}(t_n) = \mathcal{L}_n$ , podemos observar que,

$$\frac{\alpha^2 \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_1 dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}_2 dt_2 + \alpha^2 \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_1 dt_1 \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}_2 dt_2}{2!} = \frac{2\alpha^2}{2!} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q}\mathcal{L}_1 \mathcal{Q}\mathcal{L}_2 dt_2 dt_1 \quad (91)$$

E fazendo a troca de variáveis  $t_1 \leftrightarrow t_2$ ,

$$\frac{2\alpha^2}{2!} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_2} \theta(t_1 - t_2) \mathcal{Q}\mathcal{L}_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}_1 dt_1 dt_2 = \frac{2\alpha^2}{2!} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}_1 dt_1 dt_2 \quad (92)$$

Podemos reescrever o termo na forma:

$$\mathcal{T}_{\leftarrow} \frac{2\alpha^2}{2!} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}_1 dt_1 dt_2 \quad (93)$$

em que  $\mathcal{T}_{\leftarrow}$  é um operador que descreve a ordenação cronológica do tempo.

Que generalizando para o grupo de termos com  $\mathcal{Q}\rho(0)$ ,

$$\mathcal{T}_{\leftarrow} \exp \left[ \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t') dt' \right] = \mathcal{G}(t, t_0) \quad (94)$$

Já quanto aos termos restantes,

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(t) &= \alpha \int_{t_0}^t \mathbb{1} \mathcal{Q} \mathcal{L}_1 \mathcal{P} \rho_1 dt_1 + \alpha^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \rho_2 dt_2 dt_1 \\ &+ \alpha^3 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \int_{t_0}^{t_2} \mathcal{Q} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{Q} \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \rho_3 dt_3 dt_2 dt_1 + \dots \end{aligned} \quad (95)$$

observe que todos eles tem em comum o termo referente à projeção sobre a parte relevante  $\mathcal{P}\rho$ .

Novamente faremos mudança de variável,

$$\alpha^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{Q} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \rho_2 dt_2 dt_1 \Rightarrow \alpha^2 \int_{t_2}^t \int_{t_1}^t \mathcal{Q} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \rho_2 dt_2 dt_1 \quad (96)$$

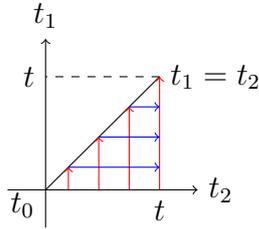


Figura 6 – Gráfico de mudança nos limites de integração: o **vermelho** representa os limites originais, em que  $t_1$  é a variável independente, já o **azul** a troca por  $t_2$  como a nova variável independente

$$\alpha^3 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \int_{t_0}^{t_2} \mathcal{Q} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{Q} \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \rho_3 dt_3 dt_2 dt_1 \Rightarrow \alpha^3 \int_{t_2}^t \int_{t_0}^{t_2} \int_{t_0}^{t_2} \mathcal{Q} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{Q} \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \rho_3 dt_3 dt_2 dt_1 \quad (97)$$

$$\Rightarrow \alpha^3 \int_{t_2}^t \int_{t_3}^t \int_{t_0}^t \mathcal{Q} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{Q} \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \rho_3 dt_3 dt_2 dt_1 \quad (98)$$

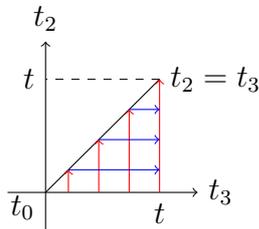


Figura 7 – Gráfico de mudança nos limites de integração: o **vermelho** representa os limites originais, em que  $t_2$  é a variável independente, já o **azul** a troca por  $t_3$  como a nova variável independente

Fazendo  $t_1 \Leftrightarrow t_3$ ,

$$\alpha^3 \int_{t_0}^t \int_{t_3}^t \int_{t_2}^t \mathcal{Q} \mathcal{L}_3 \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{Q} \mathcal{L}_1 \mathcal{P} \rho_1 dt_1 dt_2 dt_3 = \alpha^3 \int_{t_2}^t \int_{t_3}^t \int_{t_0}^t \mathcal{Q} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{Q} \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \rho_1 dt_1 dt_2 dt_3 \quad (99)$$

de modo que é possível reescrever os termos na seguinte forma:

$$\alpha \int_{t_0}^t dt_1 \left[ \mathbb{1} + \alpha \int_{t_1}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2) dt_2 + \alpha^2 \int_{t_1}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_2) \int_{t_2}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_3) dt_3 dt_2 + \dots \right] \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1) \mathcal{P}\rho(t_1), \quad (100)$$

ou seja,

$$\alpha \int_{t_0}^t \mathcal{T}_{\rightarrow} \exp \left[ \alpha \int_{t_1}^t \mathcal{Q}\mathcal{L}(t') dt' \right] \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1) \mathcal{P}\rho(t_1) dt_1 = \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{G}(t, t_1) \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1) \mathcal{P}\rho(t_1) dt_1 \quad (101)$$

Portanto, podemos escrever a expressão para a parte irrelevante como:

$$\mathcal{Q}\rho(t) = \mathcal{G}(t, t_0) \mathcal{Q}\rho(0) + \alpha \int_{t_0}^t \mathcal{G}(t, t_1) \mathcal{Q}\mathcal{L}(t_1) \mathcal{P}\rho(t_1) dt_1 \quad (102)$$

Além disso, observe que o propagador  $\mathcal{G}(t, s)$  satisfaz

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}(t, s) = \alpha \mathcal{L}(T) \mathcal{G}(t, s), \quad (103)$$

em que  $\mathcal{G}(s, s) = \mathbb{1}$  é a condição inicial.

Substituindo a equação (98) na (82)

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}\rho(t) = \alpha \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \mathcal{P}\rho(t) + \alpha \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \mathcal{G}(t, t_0) \rho(t_0) + \alpha^2 \int_{t_0}^t ds \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \mathcal{G}(t, s) \mathcal{L}(s) \mathcal{P}\rho(s). \quad (104)$$

e usando a condição (78), obtemos a equação de *Nakajima-Zwanzig*, isto é, a equação exata para os graus de liberdade do sistema reduzido

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}\rho(t) = \alpha^2 \int_{t_0}^t ds \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \mathcal{G}(t, s) \mathcal{L}(s) \mathcal{P}\rho(s) + \alpha \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \mathcal{G}(t, t_0) \rho(t_0). \quad (105)$$

Podemos observar que a equação (101) envolve termos não homogêneo como

$$\mathcal{P}\mathcal{L}(t) \mathcal{G}(t, t_0) \mathcal{Q}\rho(t_0), \quad (106)$$

dependente de condições iniciais e da integral sobre o histórico passado do sistema no intervalo  $[t_0, t]$ . Dessa forma, obtemos a descrição completa de efeitos de memória não-Markoviano da dinâmica do sistema reduzido, em que o termo  $\alpha^2 \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \mathcal{G}(t, s) \mathcal{L}(s)$  é um super operador no sub-espço relevante, conhecido como *memória Kernel*  $\mathcal{K}(t, s)$ .

Logo, a expressão final para a equação de *Nakajima-Zwanzig* é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}\rho(t) = \int_{t_0}^t ds \mathcal{K}(t, s) \mathcal{P}\rho(s) + \alpha \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \mathcal{G}(t, t_0) \rho(t_0) \quad (107)$$

Embora todo esse trabalho para encontrar a equação anterior, ela ainda apresenta tantas dificuldades para descrever a dinâmica do sistema quanto a equação de *Liouville*, mas o que torna a equação de *Nakajima-Zwanzig* vantajosa é a possibilidade de executar a técnica de *expansões perturbativas* para realizar cálculo analítico e numérico. Isto é, a equação pode ser expandida em potências de interação Hamiltoniana  $\mathcal{H}_I$ , ou até ao entorno de  $t$  no poder da *memória Kernel*, na largura do núcleo  $\mathcal{K}(t, s)$  com  $\mathcal{K}(t, s) \approx \delta(t - s)$ , que na ausência de efeitos de memória a descrição torna-se Markoviana.

Tomaremos uma condição fatorizante  $\rho(t_0) = \rho_S(t_0) \oplus \rho_R$ , com  $\mathcal{P}\rho(t_0)$  e  $\mathcal{Q}\rho(t_0) = 0$ , fazendo com que o termo não homogêneo desapareça, ficando apenas para a equação exata da parte relevante da matriz densidade:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}\rho(t) = \int_{t_0}^t ds \mathcal{K}(t, s) \mathcal{P}\rho(s) \quad (108)$$

em que a força de acoplamento de segunda ordem é

$$\mathcal{K}(t, s) = \alpha^2 \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \mathcal{I}\mathcal{Q}\mathcal{L}(s) \mathcal{P} + \mathcal{O}(\alpha^3) \quad (109)$$

e conseqüentemente equação do movimento para segunda ordem

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}\rho(t) = \alpha^2 \int_{t_0}^t ds \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \mathcal{Q}\mathcal{L}(s) \mathcal{P}\rho(s) \quad (110)$$

Também podemos observar também que se introduzirmos a explícita expressão para o operador projeção  $\mathcal{P}$  e para  $\mathcal{L}(t)$ , pela aproximação de *Born*, a qual a evolução da matriz densidade a partir da representação de *figura de interação* é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = -\alpha [\mathcal{H}_I(t), \rho(t)] \quad (111)$$

Podendo ser reescrita na forma

$$\rho(t) = \rho(t_0) - \alpha \int_{t_0}^t dt_1 [\mathcal{H}_I(t_1), \rho(t_1)] \quad (112)$$

que repetindo uma segunda interação

$$\rho(t) = \rho(t_0) - \alpha \int_{t_0}^t dt_1 [\mathcal{H}_I(t_1), \rho(t_1)] - \alpha^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} dt_1 dt_2 [\mathcal{H}_I(t_1), [\mathcal{H}_I(t_2), \rho(t_2)]] \quad (113)$$

Então invocando seguidas aproximações, se a interação é fraca, esperamos que a série resultante convirja

$$\rho(t) = \rho(0) - \sum_{n=1} \alpha^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n [\mathcal{H}_I(t_1), \dots, [\mathcal{H}_I(t_n), \rho(t_0)]] \quad (114)$$

Neste caso para a *aproximação de Born* é necessário a precisão apenas até a segunda ordem, visto que potências superiores tendem a zero rapidamente. Logo, tomando o traço sobre o banho (reservatório), obtemos:

$$\rho(t) = \rho(t_0) - \alpha \int_{t_0}^t dt_1 \text{tr}_R \{[\mathcal{H}_I(t_1), \rho(t_0)]\} - \alpha^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} dt_1 dt_2 \text{tr}_R \{[\mathcal{H}_I(t_1), [\mathcal{H}_I(t_2), \rho(t_0)]]\} \quad (115)$$

note que  $\rho(t) = \text{tr}_R \{\rho \mathcal{T}(t)\}$ , e pela suposição que o estado inicial entre o sistema e o ambiente não é correlacionado ou representado matematicamente por  $\rho \mathcal{T}(t_0) = \rho(t_0) \oplus \rho_R(t_0)$  e que  $\text{tr}_R \{\mathcal{H}_I(t_1) \rho_R\} = 0$ , temos como consequência imediata que o primeiro termo da expansão é nulo.

Assim, representando  $\rho(t) = e^{\mathcal{M}(t)\rho(t_0)}$  em que  $\mathcal{M}(t)\mathcal{X}$  um super operador da forma:

$$\mathcal{M}(t)\mathcal{X} \equiv -\alpha^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} dt_1 dt_2 \text{tr}_R \{[\mathcal{H}_I(t_1), [\mathcal{H}_I(t_2), \mathcal{X} \oplus \rho_R]]\} \quad (116)$$

e tomando derivada de  $\rho(t)$  com relação ao tempo,

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{d}{dt}[\mathcal{M}(t)] \times \rho(t) \quad (117)$$

isto é,

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\alpha^2 \int_{t_0}^t ds \text{tr}_R \{[\mathcal{H}_I(t), [\mathcal{H}_I(s), \rho(s) \oplus \rho_R]]\} \quad (118)$$

Porém essa a abordagem à Dinâmica não-Markoviana apresenta desvantagens práticas, pois embora aquela aproximação simplifique derivação das equações de movimento não facilita sua estrutura. Além disso, a equação obtida é do tipo integro-diferencial e sua solução numérica pode ser bastante trabalhosa.

## 4.2 Estudo da técnica TCL

Graças a presença de efeitos de *memória Kernel* na equação mestra encontramos dificuldades no tratamento da dinâmica, o que torna interessante o uso do método do operador projetor *time-convolutionless*, isto é, a aplicação de um operador capaz de eliminar esse 'enrolar'. Esse método consiste numa expansão sistemática da dinâmica do sistema  $S$  em termos do fator de acoplamento, aqui fizemos esse processo até a 4ª ordem do fator de acoplamento para condições iniciais fatoráveis e não fatoráveis.

### 4.2.1 A equação mestra local no tempo

Neste subseção temos o interesse em eliminar a dependência do futuro sobre a evolução temporal na história do sistema presente na equação mestra de *Nakajima-Zwanzig*. Deste modo, podemos possibilitar a derivação da exata equação mestra local no tempo para o sistema aberto.

Então considerando,

$$\rho(s) = \mathcal{G}(t, s)(\mathcal{P} + \mathcal{Q})\rho(t) \quad (119)$$

para substituir na equação (62), em que  $\mathcal{G}$  é um propagador anti-cronológico do tipo  $G(t, t_0) = \mathcal{T}_{\rightarrow} \exp\{-\alpha \int_s^t ds' \mathcal{L}(s')\}$ , obtemos:

$$\mathcal{Q}\rho(t) = \mathcal{G}(t, t_0)\mathcal{Q}\rho(t_0) + \alpha \int_{t_0}^t ds \mathcal{G}(t, s)\mathcal{Q}\mathcal{L}(s)\mathcal{P}G(t, s)(\mathcal{P} + \mathcal{Q})\rho(t) \quad (120)$$

Agora introduziremos um operador que nos permitirá facilitar o processo de expansão

$$\Sigma(t) = \alpha \int_{t_0}^t ds \mathcal{G}(t, s)\mathcal{Q}\mathcal{L}(s)\mathcal{P}G(t, s), \quad (121)$$

fica fácil perceber que podemos reescrever a equação anterior na forma:

$$[1 - \Sigma(t)] \mathcal{Q}\rho(t) = \mathcal{G}(t, t_0) \mathcal{Q}\rho(t_0) + \Sigma(t) \mathcal{P}\rho(t), \quad (122)$$

sendo interessante observar que o operador Sigma não pode ser definido como cronológico ou anti, pois ele é composto pelos dois tipos de propagadores. Além disso,  $\Sigma(t_0) = 0$  e  $\Sigma(t)|_{\alpha=0} = 0$ .

Consequentemente podemos obter a expressão (98) em termos do operador Sigma:

$$\mathcal{Q}\rho(t) = [1 - \Sigma(t)]^{-1} \Sigma(t) \mathcal{P}\rho(t) + [1 - \Sigma(t)]^{-1} \mathcal{G}(t, t_0) \mathcal{Q}\rho(t_0), \quad (123)$$

válida para acoplamentos não muito espaçados e para casos em que  $t - t_0$  é bem pequeno.

Assim a dependência histórica da parte relevante pode ser eliminada com a introdução do exato propagador anti-cronológico  $G(t, s)$  presente na equação que expressa a parte irrelevante, a qual como discutido anteriormente, auxilia a determinação da equação para  $\mathcal{P}\rho(s)$ . Portanto, tendo em vista a derivação da equação mestra 'time-convolutionless', inserimos na equação (82) a nova expressão para a parte irrelevante:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}\rho(t) = \alpha \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \left\{ [1 - \Sigma(t)]^{-1} \Sigma(t) \mathcal{P}\rho(t) + [1 - \Sigma(t)]^{-1} \mathcal{G}(t, t_0) \mathcal{Q}\rho(t_0) \right\} \quad (124)$$

$$= \mathcal{K}(t) \mathcal{P}\rho(t) + \mathcal{I}(t) \mathcal{Q}\rho(t_0), \quad (125)$$

em que

$$\mathcal{K}(t) = \alpha \mathcal{P}\mathcal{L}(t) [1 - \Sigma(t)]^{-1} \Sigma(t) \mathcal{P} \quad (126)$$

$$\mathcal{I}(t) = \alpha \mathcal{P}\mathcal{L}(t) [1 - \Sigma(t)]^{-1} \mathcal{G}(t, t_0) \mathcal{Q} \quad (127)$$

Aqui obtemos a exata equação mestra de 'time-convolutionless' (TCL), isto é, a equação local no tempo, em que operadores  $\mathcal{K}(t)$  e  $\mathcal{I}(t)$  são expandidos em potências de força de acoplamento dado por  $\alpha$ .

## 4.2.2 Expansão de perturbação do gerador TCL

Seja a expansão em série geométrica de sigma dada por:

$$[1 - \Sigma(t)]^2 = \sum_{n=0}^{\infty} [\Sigma(t)]^n \quad (128)$$

de modo que,

$$\mathcal{K}(t) = \alpha \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{P}\mathcal{L}(t) [\Sigma(t)]^n \Sigma(t) \mathcal{P} \quad (129)$$

$$= \alpha \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{P}\mathcal{L}(t) [\Sigma(t)]^n \mathcal{P} \quad (130)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \alpha^n \mathcal{K}_n(t) \quad (131)$$

Então, reescrevendo sigma na forma  $\Sigma(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha^n \Sigma_n(t)$  podemos determinar as contribuições de  $\mathcal{K}_n$  da  $n$ -ésima ordem do gerador TCL e fazer  $t_0 = 0$ :

$$\mathcal{K}_1(t) = \mathcal{P}\mathcal{L}(t)\mathbb{1}\mathcal{P} = 0; \quad (132)$$

$$\mathcal{K}_2(t) = \mathcal{P}\mathcal{L}(t)\Sigma_1(t)\mathcal{P}, \quad (133)$$

em que,

$$\Sigma_1(t) = \int_0^t ds' \mathbb{1}\mathcal{Q}\mathcal{L}(s')\mathcal{P}\mathbb{1} = \int_0^t ds' \mathcal{Q}\mathcal{L}(s')\mathcal{P}, \quad (134)$$

consequentemente,

$$\mathcal{K}_2(t) = \int_0^t ds' \mathcal{P}\mathcal{L}(s) \mathcal{Q}\mathcal{L}(s') \mathcal{P} \quad (135)$$

$$= \int_0^t ds' \mathcal{P}\mathcal{L}(s) \mathbb{1}\mathcal{L}(s')\mathcal{P} - \int_0^t ds' \mathcal{P}\mathcal{L}(s) \mathcal{P}\mathcal{L}(s')\mathcal{P} \quad (136)$$

$$= \int_0^t ds' \mathcal{P}\mathcal{L}(s) \mathbb{1}\mathcal{L}(s')\mathcal{P}; \quad (137)$$

$$\mathcal{K}_3(t) = \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \left\{ [\Sigma_1(t)]^2 + \Sigma_2(t) \right\} \mathcal{P}, \quad (138)$$

em que,

$$\Sigma_2(t) = \int_0^t ds' \int_{s'}^t ds'' \mathcal{Q}\mathcal{L}(s'') \mathcal{Q}\mathcal{L}(s') \mathcal{P} - \int_0^t ds' \mathcal{Q}\mathcal{L}(s') \mathcal{P} \int_{s'}^t ds'' \mathcal{L}(s'') \quad (139)$$

$$= \int_0^{s''} ds' \int_0^t ds'' \mathcal{Q}\mathcal{L}(s'') \mathcal{Q}\mathcal{L}(s') \mathcal{P} - \int_0^{s''} ds' \int_0^t ds'' \mathcal{Q}\mathcal{L}(s') \mathcal{P}\mathcal{L}(s'') \quad (140)$$

$$= \int_0^{s''} ds' \int_0^t ds'' [\mathcal{Q}\mathcal{L}(s'') \mathcal{Q}\mathcal{L}(s') \mathcal{P} - \mathcal{Q}\mathcal{L}(s') \mathcal{P}\mathcal{L}(s'')] \quad (141)$$

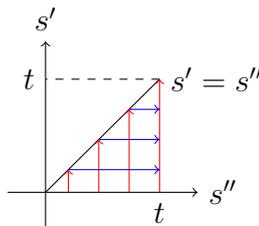


Figura 8 – Gráfico de mudança nos limites de integração: o **vermelho** representa os limites originais, em que  $s'$  é a variável independente, já o **azul** a troca por  $s''$  como a nova variável independente

Obtemos, usando as relações (73), (76) e (78),

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_3(t) = & \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \left[ \left( \int_0^t ds' (\mathbb{1} - \mathcal{P}) \mathcal{L}(s') \mathcal{P} \right)^2 + \int_0^{s''} ds' \int_0^t ds'' [\mathcal{Q}\mathcal{L}(s'') \mathcal{Q}\mathcal{L}(s') \mathcal{P} \right. \\ & \left. - \mathcal{Q}\mathcal{L}(s') \mathcal{P}\mathcal{L}(s'') \right] \mathcal{P} \end{aligned} \quad (142)$$

$$\begin{aligned} = & \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \left[ \left( \int_0^t ds' (\mathbb{1} - \mathcal{P}) \mathcal{L}(s') \mathcal{P} \right)^2 \right. \\ & \left. + \int_0^{s''} ds' \int_0^t ds'' [(\mathbb{1} - \mathcal{P}) \mathcal{L}(s'') (\mathbb{1} - \mathcal{P}) \mathcal{L}(s') \mathcal{P} - (\mathbb{1} - \mathcal{P}) \mathcal{L}(s') \mathcal{P}\mathcal{L}(s'')] \right] \mathcal{P} \end{aligned} \quad (143)$$

$$\begin{aligned} = & \mathcal{P}\mathcal{L}(t) \left[ \left( \int_0^t ds' \mathbb{1} \mathcal{L}_{s'} \mathcal{P} \right)^2 + \int_0^{s''} ds' \int_0^t ds'' [\mathcal{L}_{s''} \mathcal{L}_{s'} \mathcal{P} - \mathcal{L}_{s''} \mathcal{P} \mathcal{L}_{s'} \mathcal{P} - \mathcal{P} \mathcal{L}_{s''} \mathcal{L}_{s'} \mathcal{P} \right. \\ & \left. + \mathcal{P} \mathcal{L}_{s''} \mathcal{P} \mathcal{L}_{s'} \mathcal{P} - \mathcal{L}_{s'} \mathcal{P} \mathcal{L}_{s''} + \mathcal{P} \mathcal{L}_{s'} \mathcal{P} \mathcal{L}_{s''}] \right] \mathcal{P} \end{aligned} \quad (144)$$

$$= \int_0^{s''} ds' \int_0^t ds'' \mathcal{P}\mathcal{L}(t) [\mathcal{L}_{s''} \mathcal{L}_{s'} \mathcal{P} - \mathcal{P} \mathcal{L}_{s''} \mathcal{L}_{s'} \mathcal{P} - \mathcal{L}_{s'} \mathcal{P} \mathcal{L}_{s''}] \mathcal{P} = 0; \quad (145)$$

$$\mathcal{K}_4(t) = \mathcal{P}\mathcal{Q} \left\{ [\Sigma_1(t)]^3 + \Sigma_1(t)\Sigma_2(t) + \Sigma_2(t)\Sigma_1(t) + \Sigma_3(t) \right\} \mathcal{P}, \quad (146)$$

mas pela relação (76),  $[\Sigma_1(t)]^3 = \Sigma_1(t)\Sigma_2(t) = 0$ , desta forma

$$\mathcal{K}_4(t) = \mathcal{P}\mathcal{L} \left\{ \Sigma_2(t)\Sigma_1(t) + \Sigma_3(t) \right\} \mathcal{P}, \quad (147)$$

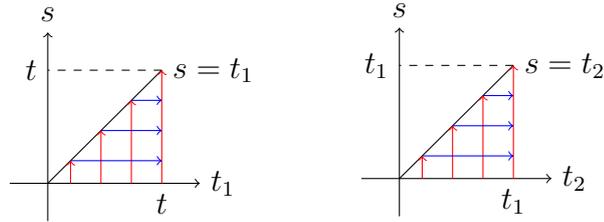
em que

$$\Sigma_3(t) = \int_0^t ds \left[ \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}_1 \mathcal{Q}\mathcal{L}_2 \mathcal{Q}\mathcal{L}_s \mathcal{P} \right] \mathbb{1} + \int_0^t ds \left[ \mathbb{1} \mathcal{Q}\mathcal{L}_s \mathcal{P} \int_s^t dt_1 \int_s^{t_1} dt_2 \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_1 \right] \quad (148)$$

$$\begin{aligned} = & \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} ds \int_s^{t_1} dt_2 (\mathbb{1}\mathcal{L}_1 - \mathcal{P}\mathcal{L}_1) (\mathbb{1} - \mathcal{P}) \mathcal{L}_2 (\mathbb{1}\mathcal{L}_s - \mathcal{P}\mathcal{L}_s) \mathcal{P} \\ & + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} ds \int_s^{t_1} dt_2 (\mathbb{1} - \mathcal{P}) \mathcal{L}_s \mathcal{P}\mathcal{L}_2 \mathcal{L}_1 \end{aligned} \quad (149)$$

$$\begin{aligned} = & \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} ds (\mathbb{1}\mathcal{L}_1 - \mathcal{P}\mathcal{L}_1) (\mathbb{1} - \mathcal{P}) \mathcal{L}_2 (\mathbb{1}\mathcal{L}_s - \mathcal{P}\mathcal{L}_s) \mathcal{P} \\ & + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} ds (\mathbb{1} - \mathcal{P}) \mathcal{L}_s \mathcal{P}\mathcal{L}_2 \mathcal{L}_1 \end{aligned} \quad (150)$$

$$= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} ds (\mathcal{L}_1 \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_s \mathcal{P} - \mathcal{L}_1 \mathcal{P} \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_s \mathcal{P} + \mathcal{L}_s \mathcal{P} \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_1) \quad (151)$$



1<sup>a</sup> mudança nos limites    2<sup>a</sup> mudança nos limites

Figura 9 – Gráficos de mudança nos limites de integração: o **vermelho** representa os limites originais, em que  $s$  é para ambos a variável independente, já o **azul** a troca por respectivamente  $t_1$  e  $t_2$  como a novas variáveis independentes

Fazendo  $s = t_3$ , obtemos

$$\Sigma_3(t) = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 (\mathcal{L}_1 \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_{t_3} \mathcal{P} - \mathcal{L}_1 \mathcal{P} \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_{t_3} \mathcal{P} + \mathcal{L}_{t_3} \mathcal{P} \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_1). \quad (152)$$

Além disso,

$$\Sigma_2(t) \Sigma_1(t) = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [\mathcal{Q} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{P} - \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1] \int_0^t dt_3 \mathcal{Q} \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \quad (153)$$

$$= - \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^t dt_3 \mathcal{Q} \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \quad (154)$$

$$= - \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^t dt_3 (\mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_3 \mathcal{P} - \mathcal{P} \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{Q} \mathcal{L}_3 \mathcal{P}) \quad (155)$$

$$= - \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^t dt_3 (\mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} - \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{P} \mathcal{L}_3 \mathcal{P}) \quad (156)$$

$$= - \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^t dt_3 \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \quad (157)$$

$$= - \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \left[ \int_0^{t_2} dt_3 \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} + \int_{t_2}^{t_1} dt_3 \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} + \int_{t_1}^t dt_3 \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \right], \quad (158)$$

aqui analisamos o segundo e terceiro termo separadamente para reescrevê-los de uma forma mais enxuta, observe:

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_{t_2}^{t_1} dt_3 \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^{t_1} dt_3 \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \quad (159)$$

$$= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_2} dt_3 \int_0^{t_1} dt_2 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{L}_2 \mathcal{P}, \quad (160)$$

pela substituição  $t_1 \Leftrightarrow t_3$ .

Analogamente, para o terceiro termo

$$\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_{t_1}^t dt_3 \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^t dt_3 \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \quad (161)$$

$$= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^t dt_3 \mathcal{L}_2 \mathcal{P} \mathcal{L}_1 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \quad (162)$$

$$= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_2} dt_3 \int_0^{t_1} dt_2 \mathcal{L}_3 \mathcal{P} \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_1, \quad (163)$$

pela substituição cíclica  $t_1 \rightarrow t_2 \rightarrow t_3 \rightarrow t_1$ .

Isto é,

$$\Sigma_2(t)\Sigma_1(t) = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_2} dt_3 \int_0^{t_1} dt_2 [\mathcal{L}_2\mathcal{P}\mathcal{L}_1\mathcal{L}_3\mathcal{P} + \mathcal{L}_3\mathcal{P}\mathcal{L}_1\mathcal{L}_2\mathcal{P} + \mathcal{L}_3\mathcal{P}\mathcal{L}_2\mathcal{L}_1] \quad (164)$$

De modo que,

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_4(t) = & \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_3 \int_0^{t_2} dt_2 \mathcal{P}\mathcal{L} [\mathcal{L}_1\mathcal{L}_2\mathcal{L}_3\mathcal{P} - \mathcal{L}_1\mathcal{P}\mathcal{L}_2\mathcal{L}_3\mathcal{P} - \mathcal{L}_2\mathcal{P}\mathcal{L}_1\mathcal{L}_3\mathcal{P} \\ & - \mathcal{L}_3\mathcal{P}\mathcal{L}_2\mathcal{L}_1] \mathcal{P}. \end{aligned} \quad (165)$$

O gerador de segunda ordem  $\mathcal{K}_2(t)$  da equação mestra em TCL equivale à equação (118). No entanto, a técnica que acabamos de descrever é mais vantajosa pois o gerador não é local no tempo, ou seja, não envolve a convolução de *Kernel*, que como já havíamos dito é bastante complicada.

É possível tornar as expressões para  $\mathcal{K}_2(t)$  e  $\mathcal{K}_4(t)$  mais explícitas ao escrever a *interação Hamiltoniana* como a *soma dos produtos de operadores Hermitianos*  $F_k$  e  $Q_k$ , isto é,

$$H_I = \sum_n F_k \otimes Q_k, \quad (166)$$

definindo  $\nu_{ij}(t_1, t_2) = \Re \text{tr}_R \{Q_i(t_1), Q_j(t_2)\rho_R\}$  e  $\eta_{ij}(t_1, t_2) = \Im \text{tr}_R \{Q_i(t_1), Q_j(t_2)\rho_R\}$  e denotando por  $F_{in}(t) = \hat{n}$ .

Desta forma, para os momentos de segunda ordem, tem-se  $\text{tr}_R \{H_I(T)H_I(t_2)\rho_S \otimes \rho_R\} = \sum_{i_0, i_1} (\nu_{01} + i\eta_{01})\hat{0}\hat{1}\rho_S$

Então, sabendo que  $P\rho = \text{tr}_R \{\rho\} \otimes \rho_R = \rho_S \otimes \rho_R$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_2(t)\rho_S \otimes \rho_R &= \int_0^t dt_1 \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{L}_1\mathcal{P}\rho_S \otimes \rho_R \\ &= \int_0^t dt_1 \mathcal{P}\mathcal{L}(-i) [H_I, \rho_S \otimes \rho_R] \\ &= (-i)^2 \int_0^t dt_1 \mathcal{P} [H_I, [H_I, \rho_S \otimes \rho_R]] \\ &= - \int_0^t dt_1 \text{tr}_R \{[H_{i_0}, H_{i_1}\rho_S \otimes \rho_R - \rho_S \otimes \rho_R H_{i_1}]\} \\ &= - \sum_{i_0, i_1} \int_0^t dt_1 \text{tr}_R \{H_{i_0} (H_{i_1}\rho_S \otimes \rho_R - \rho_S \otimes \rho_R H_{i_1}) \\ &\quad - H_{i_0} (H_{i_1}\rho_S \otimes \rho_R - \rho_S \otimes \rho_R H_{i_1})\} \otimes \rho_R \\ &= - \sum_{i_0, i_1} \int_0^t dt_1 \text{tr}_R \{H_{i_0} H_{i_1} \rho_S \otimes \rho_R - H_{i_0} \rho_S \otimes \rho_R H_{i_1} - H_{i_1} \rho_S \otimes \rho_R H_{i_0} \\ &\quad + \rho_S \otimes \rho_R H_{i_1} H_{i_0}\} \otimes \rho_R \end{aligned} \quad (167)$$

Note que para o primeiro termo da expressão, fazendo  $\langle Q_{i0}Q_{i1} \rangle = \text{tr}_R \{Q_{i0}Q_{i1}\rho_R\}$  tem-se:

$$\begin{aligned} \text{tr}_R \{ (F_{i0} \otimes Q_{i0}) (F_{i1} \otimes Q_{i1}) \rho_S \otimes \rho_R \} &= \text{tr}_R \{ F_{i0}F_{i1}\rho_S \otimes Q_{i0}Q_{i1}\rho_R \} \\ &= F_{i0}F_{i1}\rho_S \text{tr}_R \{ Q_{i0}Q_{i1}\rho_R \} \\ &= F_{i0}F_{i1}\rho_S \langle Q_{i0}Q_{i1} \rangle, \end{aligned} \quad (168)$$

por conseguinte, denotando  $g_{ij} = (\nu_{ij} + i\eta_{ij})$ , a expressão anterior pode ser dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_2(t)\rho_S \otimes \rho_R &= - \sum_{i0,i1} \int_0^t dt_1 (F_{i0}F_{i1}\rho_S \langle Q_{i0}Q_{i1} \rangle - F_{i0}\rho_S \langle Q_{i0}Q_{i1} \rangle F_{i1} - F_{i1}\rho_S \langle Q_{i1}Q_{i0} \rangle F_{i0} \\ &\quad + \rho_S F_{i1}F_{i0} \langle Q_{i1}Q_{i0} \rangle) \otimes \rho_R \\ &= - \sum_{i0,i1} \int_0^t dt_1 (\hat{0}\hat{1}\rho_S g_{01} - \hat{0}\rho_S g_{01}\hat{1} - \hat{1}\rho_S g_{10}\hat{0} + \rho_S \hat{1}\hat{0}g_{10}) \otimes \rho_R \\ &= - \sum_{i0,i1} \int_0^t dt_1 (\nu_{01} [\hat{0}, [\hat{1}, \rho_S]] + i\eta_{01} [\hat{0}, [\hat{1}, \rho_S]]) \otimes \rho_R \end{aligned} \quad (169)$$

pois  $g_{01} = \nu_{i0,i1}(t, t_1) + i\eta_{i0,i1}(t, t_1) = \nu_{i1,i0}(t_1, t) + i\eta_{i1,i0}(t_1, t) = g_{10}$ .

Analogamente é possível proceder para os termos de quarta ordem e rearranjá-los, lembrando que:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_4(t)\rho_S \otimes \rho_R &= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 (\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{L}_1\mathcal{L}_2\mathcal{L}_3\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{L}_1\mathcal{P}\mathcal{L}_2\mathcal{L}_3\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{L}_2\mathcal{P}\mathcal{L}_1\mathcal{L}_3\mathcal{P} \\ &\quad - \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{L}_3\mathcal{P}\mathcal{L}_2\mathcal{L}_1\mathcal{P}) \rho_S \otimes \rho_R, \end{aligned} \quad (170)$$

para cada um destes quatro termos da expressão, obtêm-se 16 novos termos. Nesta pesquisa separamos o primeiro termo dos três demais, pois para os últimos, a solução generalizada de um era válida para o restante do grupo.

Usando a relação já conhecida por  $\mathcal{L}\theta = (-i)[H, \theta]$  no primeiro termo da equação (170):

$$\begin{aligned} [H_0, [H_1, [H_2, [H_3, \rho]]]] &= H_0H_1H_2H_3\rho - H_1H_2H_3\rho H_0 - H_0H_2H_3\rho H_1 + H_2H_3\rho H_1H_0 \\ &\quad - H_0H_1H_3\rho H_2 + H_1H_3\rho H_2H_0 + H_0H_3\rho H_2H_1 - H_3\rho H_2H_1H_0 \\ &\quad - H_0H_1H_2\rho H_3 + H_1H_2\rho H_3H_0 + H_0H_2\rho H_3H_1 - H_2\rho H_3H_1H_0 \\ &\quad + H_0H_1\rho H_3H_2 - H_1\rho H_3H_2H_0 - H_0\rho H_3H_2H_1 + \rho H_3H_2H_1H_0, \end{aligned} \quad (171)$$

em que cada um destes termos podem ser reescritos na forma de somatórios como anteriormente feito para o termo de segunda ordem, como apresentados a seguir, omitindo a integração tripla e o símbolo de somatório (vide a tabela 1):

Tabela 1 – Primeiro grupo de termos de quarta ordem

n	resultado
1	$[(\nu_{01} + i\eta_{01})(\nu_{23} + i\eta_{23}) + (\nu_{02} + i\eta_{02})(\nu_{13} + i\eta_{13}) + (\nu_{03} + i\eta_{03})(\nu_{12} + i\eta_{12})] \hat{0}\hat{1}\hat{2}\hat{3}\rho_S$
2	$-[(\nu_{01} + i\eta_{01})(\nu_{23} + i\eta_{23}) + (\nu_{02} + i\eta_{02})(\nu_{13} + i\eta_{13}) + (\nu_{03} + i\eta_{03})(\nu_{12} + i\eta_{12})] \hat{1}\hat{2}\hat{3}\rho_S\hat{0}$
3	$-[(\nu_{10} + i\eta_{10})(\nu_{23} + i\eta_{23}) + (\nu_{12} + i\eta_{12})(\nu_{03} + i\eta_{03}) + (\nu_{13} + i\eta_{13})(\nu_{02} + i\eta_{02})] \hat{0}\hat{2}\hat{3}\rho_S\hat{1}$
4	$[(\nu_{10} + i\eta_{10})(\nu_{23} + i\eta_{23}) + (\nu_{12} + i\eta_{12})(\nu_{03} + i\eta_{03}) + (\nu_{13} + i\eta_{13})(\nu_{02} + i\eta_{02})] \hat{2}\hat{3}\rho_S\hat{1}\hat{0}$
5	$-[(\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{13} + i\eta_{13}) + (\nu_{21} + i\eta_{21})(\nu_{03} + i\eta_{03}) + (\nu_{23} + i\eta_{23})(\nu_{01} + i\eta_{01})] \hat{0}\hat{1}\hat{3}\rho_S\hat{2}$
6	$[(\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{13} + i\eta_{13}) + (\nu_{21} + i\eta_{21})(\nu_{03} + i\eta_{03}) + (\nu_{23} + i\eta_{23})(\nu_{01} + i\eta_{01})] \hat{1}\hat{3}\rho_S\hat{2}\hat{0}$
7	$[(\nu_{21} + i\eta_{21})(\nu_{03} + i\eta_{03}) + (\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{13} + i\eta_{13}) + (\nu_{23} + i\eta_{23})(\nu_{10} + i\eta_{10})] \hat{0}\hat{3}\rho_S\hat{2}\hat{1}$
8	$-[(\nu_{21} + i\eta_{21})(\nu_{03} + i\eta_{03}) + (\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{13} + i\eta_{13}) + (\nu_{23} + i\eta_{23})(\nu_{10} + i\eta_{10})] \hat{3}\rho_S\hat{2}\hat{1}\hat{0}$
9	$-[(\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{12} + i\eta_{12}) + (\nu_{31} + i\eta_{31})(\nu_{02} + i\eta_{02}) + (\nu_{32} + i\eta_{32})(\nu_{01} + i\eta_{01})] \hat{0}\hat{1}\hat{2}\rho_S\hat{3}$
10	$[(\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{12} + i\eta_{12}) + (\nu_{31} + i\eta_{31})(\nu_{02} + i\eta_{02}) + (\nu_{32} + i\eta_{32})(\nu_{01} + i\eta_{01})] \hat{1}\hat{2}\rho_S\hat{3}\hat{0}$
11	$[(\nu_{31} + i\eta_{31})(\nu_{02} + i\eta_{02}) + (\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{12} + i\eta_{12}) + (\nu_{32} + i\eta_{32})(\nu_{10} + i\eta_{10})] \hat{0}\hat{2}\rho_S\hat{3}\hat{1}$
12	$-[(\nu_{31} + i\eta_{31})(\nu_{02} + i\eta_{02}) + (\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{12} + i\eta_{12}) + (\nu_{32} + i\eta_{32})(\nu_{10} + i\eta_{10})] \hat{2}\rho_S\hat{3}\hat{1}\hat{0}$
13	$[(\nu_{32} + i\eta_{32})(\nu_{01} + i\eta_{01}) + (\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{21} + i\eta_{21}) + (\nu_{31} + i\eta_{31})(\nu_{20} + i\eta_{20})] \hat{0}\hat{1}\rho_S\hat{3}\hat{2}$
14	$-[(\nu_{32} + i\eta_{32})(\nu_{01} + i\eta_{01}) + (\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{21} + i\eta_{21}) + (\nu_{31} + i\eta_{31})(\nu_{20} + i\eta_{20})] \hat{1}\rho_S\hat{3}\hat{2}\hat{0}$
15	$-[(\nu_{32} + i\eta_{32})(\nu_{10} + i\eta_{10}) + (\nu_{31} + i\eta_{31})(\nu_{20} + i\eta_{20}) + (\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{21} + i\eta_{21})] \hat{0}\rho_S\hat{3}\hat{2}\hat{1}$
16	$[(\nu_{32} + i\eta_{32})(\nu_{10} + i\eta_{10}) + (\nu_{31} + i\eta_{31})(\nu_{20} + i\eta_{20}) + (\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{21} + i\eta_{21})] \rho_S\hat{3}\hat{2}\hat{1}\hat{0}$

que podem ser reescrito como:

$$\begin{aligned}
& (\nu_{02}\nu_{13} + \nu_{03}\nu_{12}) [\hat{0}, [\hat{1}, [\hat{2}, [\hat{3}, \rho_S]]]] + i(\nu_{02}\eta_{13}) [\hat{0}, [\hat{1}, [\hat{2}, \{\hat{3}, \rho_S\}]]] \\
& + i(\eta_{02}\nu_{13}) [\hat{0}, [\hat{1}, [\hat{2}\hat{3}\rho_S + \hat{3}\rho_S\hat{2} - \hat{2}\rho_S\hat{3} - \rho_S\hat{3}\hat{2}]]] + i(\eta_{03}\nu_{12}) [\hat{0}, [\hat{1}, [\hat{2}, \{\hat{3}, \rho_S\}]]] \\
& + i(\nu_{03}\eta_{12}) [\hat{0}, [\hat{1}, [\hat{2}\hat{3}\rho_S + \hat{3}\rho_S\hat{2} - \hat{2}\rho_S\hat{3} - \rho_S\hat{3}\hat{2}]]] + (\nu_{01}\nu_{23}) [\hat{0}, [\hat{1}, [\hat{2}, [\hat{3}, \rho_S]]]] \\
& - (\eta_{02}\eta_{13}) [\hat{0}, [\hat{1}, [\hat{2}\hat{3}\rho_S + \hat{3}\rho_S\hat{2} + \hat{2}\rho_S\hat{3} + \rho_S\hat{3}\hat{2}]]] + i(\nu_{01}\eta_{23}) [\hat{0}, [\hat{1}, [\hat{2}, \{\hat{3}, \rho_S\}]]] \\
& - (\eta_{03}\eta_{12}) [\hat{0}, [\hat{1}, [\hat{2}\hat{3}\rho_S + \hat{3}\rho_S\hat{2} + \hat{2}\rho_S\hat{3} + \rho_S\hat{3}\hat{2}]]] + i(\eta_{01}\nu_{23}) [\hat{0}, [\hat{1}, [\hat{2}, [\hat{3}, \rho_S]]]] \\
& - (\eta_{01}\eta_{23}) [\hat{0}, [\hat{1}, [\hat{2}, \{\hat{3}, \rho_S\}]]] \quad (172)
\end{aligned}$$

Quanto aos demais termos, obtêm-se-os pela solução generalizada de  $\mathcal{P}\mathcal{L}_i\mathcal{L}_j\mathcal{P}\mathcal{L}_i\mathcal{L}_m\mathcal{P}\rho_S \otimes \rho_R$ .

Observe que,

$$\begin{aligned}
(-i)\mathcal{P}\mathcal{L}_i\mathcal{L}_j\mathcal{P}\mathcal{L}l[H_m, \rho] &= (-i)^2\mathcal{P}\mathcal{L}_i\mathcal{L}_j\mathcal{P}[H_l, H_m\rho - \rho H_m] \quad (173) \\
&= (-i)^2\mathcal{P}\mathcal{L}_i\mathcal{L}_j \sum_{l',m'} \left( F_{l,l'} F_{m,m'} \rho_S \text{tr}_R \{ Q_{l,l'} Q_{m,m'} \rho_R \} \right. \\
&\quad \left. - F_{m,m'} \rho_S F_{l,l'} \text{tr}_R \{ Q_{l,l'} \rho_R Q_{m,m'} \} - F_{l,l'} \rho_S F_{m,m'} \text{tr}_R \{ Q_{l,l'} \rho_R Q_{m,m'} \} \right. \\
&\quad \left. + \rho_S F_{l,l'} F_{m,m'} \text{tr}_R \{ \rho_R Q_{l,l'} Q_{m,m'} \} \right) \\
&= (-i)^2\mathcal{P}\mathcal{L}_i\mathcal{L}_j \sum_{l',m'} \left[ (F_{l,l'} F_{m,m'} \rho_S - F_{m,m'} \rho_S F_{l,l'}) \text{tr}_R \{ Q_{l,l'} Q_{m,m'} \rho_R \} \right. \\
&\quad \left. + (\rho_S F_{m,m'} F_{l,l'} - F_{l,l'} \rho_S F_{m,m'}) \text{tr}_R \{ Q_{m,m'} Q_{l,l'} \rho_R \} \right] \otimes \rho_R, \quad (174)
\end{aligned}$$

e fazendo  $A_{l,l',m,m'} = (F_{l,l'}F_{m,m'}\rho_S - F_{m,m'}\rho_SF_{l,l'})$  e  $B_{l,l',m,m'} = (\rho_SF_{m,m'}F_{l,l'} - F_{l,l'}\rho_SF_{m,m'})$ , obtêm-se:

$$\begin{aligned}
& (-i)^2 \mathcal{P} \mathcal{L}_i \mathcal{L}_j \sum_{l',m'} \left( A_{l,l',m,m'} \langle Q_{l,l'}, Q_{m,m'} \rangle + B_{l,l',m,m'} \langle Q_{m,m'} Q_{l,l'} \rangle \right) \otimes \rho_R = \\
& (-i)^3 \mathcal{P} \mathcal{L}_i \sum_{l',m'} \left( [H_j, A_{l,l',m,m'} \otimes \rho_B] \langle Q_{l,l'}, Q_{m,m'} \rangle + [H_i, B_{l,l',m,m'} \otimes \rho_R] \langle Q_{m,m'}, Q_{l,l'} \rangle \right) = \\
& (-i)^4 \mathcal{P} \sum_{l',m'} \left( [H_i, [H_j, A_{l,l',m,m'} \otimes \rho_R]] \langle Q_{l,l'}, Q_{m,m'} \rangle + [H_i, [H_j, B_{l,l',m,m'} \otimes \rho_B]] \langle Q_{m,m'}, Q_{l,l'} \rangle \right) = \\
& (-i)^4 \mathcal{P} \sum_{l',m'} \left[ (H_i H_j A_{l,l',m,m'} \otimes \rho_R - H_j A_{l,l',m,m'} \otimes \rho_R H_i - H_i A_{l,l',m,m'} \otimes \rho_R H_j \right. \\
& + A_{l,l',m,m'} \otimes \rho_R H_j H_i) \langle Q_{l,l'}, Q_{m,m'} \rangle + (H_i H_j B_{l,l',m,m'} \otimes \rho_R - H_j B_{l,l',m,m'} \otimes \rho_R H_i \\
& \left. - H_i B_{l,l',m,m'} \otimes \rho_R H_j + B_{l,l',m,m'} \otimes \rho_R H_j H_i) \langle Q_{m,m'}, Q_{l,l'} \rangle \right] \quad (175)
\end{aligned}$$

em que na substituição dos termos  $H$ ,  $A_{l,l',m,m'}$ ,  $B_{l,l',m,m'}$  e organização da expressão resultante, é alcançada a solução geral:

$$\begin{aligned}
& (-i)^4 \sum_{l',m',i,j} \{ [F_{i,i'} F_{j,j'} F_{l,l'} F_{m,m'} \rho_S - F_{i,i'} F_{j,j'} F_{m,m'} \rho_S F_{l,l'} - F_{j,j'} F_{l,l'} F_{m,m'} \rho_S F_{i,i'} \\
& + F_{j,j'} F_{m,m'} \rho_S F_{l,l'} F_{i,i'}] \langle Q_{i,i'}, Q_{j,j'} \rangle \langle Q_{l,l'}, Q_{m,m'} \rangle + [-F_{i,i'} F_{l,l'} F_{m,m'} \rho_S F_{j,j'} \\
& + F_{i,i'} F_{m,m'} \rho_S F_{l,l'} F_{j,j'} + F_{l,l'} F_{m,m'} \rho_S F_{j,j'} F_{i,i'} - F_{m,m'} \rho_S F_{l,l'} F_{j,j'} F_{i,i'}] \langle Q_{j,j'}, Q_{i,i'} \rangle \langle Q_{l,l'}, Q_{m,m'} \rangle \\
& [F_{i,i'} F_{j,j'} \rho_S F_{m,m'} F_{l,l'} - F_{i,i'} F_{j,j'} F_{l,l'} \rho_S F_{m,m'} - F_{j,j'} \rho_S F_{m,m'} F_{l,l'} F_{i,i'} + F_{j,j'} F_{l,l'} \rho_S F_{m,m'} F_{i,i'}] \\
& \cdot \langle Q_{i,i'}, Q_{j,j'} \rangle \langle Q_{m,m'}, Q_{l,l'} \rangle + [\rho_S F_{m,m'} F_{l,l'} F_{j,j'} F_{i,i'} - F_{l,l'} \rho_S F_{m,m'} F_{j,j'} F_{i,i'} \\
& - F_{i,i'} \rho_S F_{m,m'} F_{l,l'} F_{j,j'} + F_{i,i'} F_{l,l'} \rho_S F_{m,m'} F_{j,j'}] \langle Q_{i,i'}, Q_{j,j'} \rangle \langle Q_{m,m'}, Q_{l,l'} \rangle \} \quad (176)
\end{aligned}$$

a qual permite se escrever os termos referentes aos 3 outros termos da equação (144)

Tabela 2 – Segundo grupo de termos de quarta ordem

n	resultado
1	$(\nu_{01} + i\eta_{01})(\nu_{23} + i\eta_{23})\hat{0}\hat{1}\hat{2}\hat{3}\rho_S$
2	$-(\nu_{01} + i\eta_{01})(\nu_{23} + i\eta_{23})\hat{1}\hat{2}\hat{3}\rho_S\hat{0}$
3	$-(\nu_{10} + i\eta_{10})(\nu_{23} + i\eta_{23})\hat{0}\hat{2}\hat{3}\rho_S\hat{1}$
4	$(\nu_{10} + i\eta_{10})(\nu_{23} + i\eta_{23})\hat{2}\hat{3}\rho_S\hat{1}\hat{0}$
5	$-(\nu_{01} + i\eta_{01})(\nu_{23} + i\eta_{23})\hat{0}\hat{1}\hat{3}\rho_S\hat{2}$
6	$(\nu_{01} + i\eta_{01})(\nu_{23} + i\eta_{23})\hat{1}\hat{3}\rho_S\hat{2}\hat{0}$
7	$(\nu_{10} + i\eta_{10})(\nu_{23} + i\eta_{23})\hat{0}\hat{3}\rho_S\hat{2}\hat{1}$
8	$-(\nu_{10} + i\eta_{10})(\nu_{23} + i\eta_{23})\hat{3}\rho_S\hat{2}\hat{1}\hat{0}$
9	$-(\nu_{01} + i\eta_{01})(\nu_{32} + i\eta_{32})\hat{0}\hat{1}\hat{2}\rho_S\hat{3}$
10	$(\nu_{01} + i\eta_{01})(\nu_{32} + i\eta_{32})\hat{1}\hat{2}\rho_S\hat{3}\hat{0}$
11	$(\nu_{10} + i\eta_{10})(\nu_{32} + i\eta_{32})\hat{0}\hat{2}\rho_S\hat{3}\hat{1}$
12	$-(\nu_{10} + i\eta_{10})(\nu_{32} + i\eta_{32})\hat{2}\rho_S\hat{3}\hat{1}\hat{0}$
13	$(\nu_{01} + i\eta_{01})(\nu_{32} + i\eta_{32})\hat{0}\hat{1}\rho_S\hat{3}\hat{2}$
14	$-(\nu_{01} + i\eta_{01})(\nu_{32} + i\eta_{32})\hat{1}\rho_S\hat{3}\hat{2}\hat{0}$
15	$-(\nu_{10} + i\eta_{10})(\nu_{32} + i\eta_{32})\hat{0}\rho_S\hat{3}\hat{2}\hat{1}$
16	$(\nu_{10} + i\eta_{10})(\nu_{32} + i\eta_{32})\rho_S\hat{3}\hat{2}\hat{1}\hat{0}$

que pode ser reescrito na forma:

$$\begin{aligned}
& + (\nu_{01}\nu_{23}) \left[ \hat{0}, \left[ \hat{1}, \left[ \hat{2}, \left[ \hat{3}, \rho_S \right] \right] \right] \right] + i(\nu_{01}\eta_{23}) \left[ \hat{0}, \left[ \hat{1}, \left[ \hat{2}, \left\{ \hat{3}, \rho_S \right\} \right] \right] \right] \\
& + i(\eta_{01}\nu_{23}) \left[ \hat{0}, \left\{ \hat{1}, \left[ \hat{2}, \left[ \hat{3}, \rho_S \right] \right] \right\} \right] - (\eta_{01}\eta_{23}) \left[ \hat{0}, \left\{ \hat{1}, \left[ \hat{2}, \left\{ \hat{3}, \rho_S \right\} \right] \right\} \right]
\end{aligned} \tag{177}$$

e como pode-se observar, é varrido quando somado ao primeiro grupo.

Tabela 3 – Terceiro grupo de termos de quarta ordem

n	resultado
1	$(\nu_{02} + i\eta_{02})(\nu_{13} + i\eta_{13})\hat{0}\hat{2}\hat{1}\hat{3}\rho_S$
2	$-(\nu_{02} + i\eta_{02})(\nu_{13} + i\eta_{13})\hat{2}\hat{1}\hat{3}\rho_S\hat{0}$
3	$-(\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{13} + i\eta_{13})\hat{0}\hat{1}\hat{3}\rho_S\hat{2}$
4	$(\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{13} + i\eta_{13})\hat{1}\hat{3}\rho_S\hat{2}\hat{0}$
5	$-(\nu_{02} + i\eta_{02})(\nu_{13} + i\eta_{13})\hat{0}\hat{2}\hat{3}\rho_S\hat{1}$
6	$(\nu_{02} + i\eta_{02})(\nu_{13} + i\eta_{13})\hat{2}\hat{3}\rho_S\hat{1}\hat{0}$
7	$(\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{13} + i\eta_{13})\hat{0}\hat{3}\rho_S\hat{1}\hat{2}$
8	$-(\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{13} + i\eta_{13})\hat{3}\rho_S\hat{1}\hat{2}\hat{0}$
9	$-(\nu_{02} + i\eta_{02})(\nu_{31} + i\eta_{31})\hat{0}\hat{2}\hat{1}\rho_S\hat{3}$
10	$(\nu_{02} + i\eta_{02})(\nu_{31} + i\eta_{31})\hat{2}\hat{1}\rho_S\hat{3}\hat{0}$
11	$(\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{31} + i\eta_{31})\hat{0}\hat{1}\rho_S\hat{3}\hat{2}$
12	$-(\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{31} + i\eta_{31})\hat{1}\rho_S\hat{3}\hat{2}\hat{0}$
13	$(\nu_{02} + i\eta_{02})(\nu_{31} + i\eta_{31})\hat{0}\hat{2}\rho_S\hat{3}\hat{1}$
14	$-(\nu_{02} + i\eta_{02})(\nu_{31} + i\eta_{31})\hat{2}\rho_S\hat{3}\hat{1}\hat{0}$
15	$-(\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{31} + i\eta_{31})\hat{0}\rho_S\hat{3}\hat{1}\hat{2}$
16	$(\nu_{20} + i\eta_{20})(\nu_{31} + i\eta_{31})\rho_S\hat{3}\hat{1}\hat{2}\hat{0}$

analogamente:

$$\begin{aligned}
& + (\nu_{02}\nu_{13}) \left[ \hat{0}, \left[ \hat{2}, \left[ \hat{1}, \left[ \hat{3}, \rho_S \right] \right] \right] \right] + i(\nu_{02}\eta_{13}) \left[ \hat{0}, \left[ \hat{2}, \left[ \hat{1}, \left\{ \hat{3}, \rho_S \right\} \right] \right] \right] \\
& + i(\eta_{02}\nu_{13}) \left[ \hat{0}, \left\{ \hat{2}, \left[ \hat{1}, \left[ \hat{3}, \rho_S \right] \right] \right\} \right] - (\eta_{02}\eta_{13}) \left[ \hat{0}, \left\{ \hat{2}, \left[ \hat{1}, \left\{ \hat{3}, \rho_S \right\} \right] \right\} \right]
\end{aligned} \tag{178}$$

Tabela 4 – Quarto grupo de termos de quarta ordem

n	resultado
1	$(\nu_{03} + i\eta_{03})(\nu_{12} + i\eta_{12}) \hat{0}\hat{3}\hat{1}\hat{2}\rho_S$
2	$-(\nu_{03} + i\eta_{03})(\nu_{12} + i\eta_{12}) \hat{3}\hat{1}\hat{2}\rho_S\hat{0}$
3	$-(\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{12} + i\eta_{12}) \hat{0}\hat{1}\hat{2}\rho_S\hat{3}$
4	$(\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{12} + i\eta_{12}) \hat{1}\hat{2}\rho_S\hat{3}\hat{0}$
5	$-(\nu_{03} + i\eta_{03})(\nu_{12} + i\eta_{12}) \hat{0}\hat{3}\hat{2}\rho_S\hat{1}$
6	$(\nu_{03} + i\eta_{03})(\nu_{12} + i\eta_{12}) \hat{3}\hat{2}\rho_S\hat{1}\hat{0}$
7	$(\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{12} + i\eta_{12}) \hat{0}\hat{2}\rho_S\hat{1}\hat{3}$
8	$-(\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{12} + i\eta_{12}) \hat{2}\rho_S\hat{1}\hat{3}\hat{0}$
9	$-(\nu_{03} + i\eta_{03})(\nu_{21} + i\eta_{21}) \hat{0}\hat{3}\hat{1}\rho_S\hat{2}$
10	$(\nu_{03} + i\eta_{03})(\nu_{21} + i\eta_{21}) \hat{3}\hat{1}\rho_S\hat{2}\hat{0}$
11	$(\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{21} + i\eta_{21}) \hat{0}\hat{1}\rho_S\hat{2}\hat{3}$
12	$-(\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{21} + i\eta_{21}) \hat{1}\rho_S\hat{2}\hat{3}\hat{0}$
13	$(\nu_{03} + i\eta_{03})(\nu_{21} + i\eta_{21}) \hat{0}\hat{3}\rho_S\hat{2}\hat{1}$
14	$-(\nu_{03} + i\eta_{03})(\nu_{21} + i\eta_{21}) \hat{3}\rho_S\hat{2}\hat{1}\hat{0}$
15	$-(\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{21} + i\eta_{21}) \hat{0}\rho_S\hat{2}\hat{1}\hat{3}$
16	$(\nu_{30} + i\eta_{30})(\nu_{21} + i\eta_{21}) \rho_S\hat{2}\hat{1}\hat{3}\hat{0}$

isto é:

$$\begin{aligned}
& + \nu_{03}\nu_{12} \left[ \hat{0}, \left[ \hat{3}, \left[ \hat{1}, \left[ \hat{2}, \rho_S \right] \right] \right] \right] + i\nu_{03}\eta_{12} \left[ \hat{0}, \left[ \hat{3}, \left[ \hat{1}, \left\{ \hat{2}, \rho_S \right\} \right] \right] \right] \\
& + i\eta_{03}\nu_{12} \left[ \hat{0}, \left\{ \hat{3}, \left[ \hat{1}, \left[ \hat{2}, \rho_S \right] \right] \right\} \right] - \eta_{03}\eta_{12} \left[ \hat{0}, \left\{ \hat{3}, \left[ \hat{1}, \left\{ \hat{2}, \rho_S \right\} \right] \right\} \right]
\end{aligned} \tag{179}$$

Neste, caso obtemos o resultado final:

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}_4(t)\rho_S \otimes \rho_R = & \sum_{i0,i1,i2,i3} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \\
& \left( \nu_{02}\nu_{13} \left[ \hat{0}, \left[ \left[ \hat{1}, \hat{2} \right], \left[ \hat{3}, \rho_S \right] \right] \right] + i\nu_{02}\eta_{13} \left[ \hat{0}, \left[ \left[ \hat{1}, \hat{2} \right], \left\{ \hat{3}, \rho_S \right\} \right] \right] \right. \\
& + \eta_{02}\nu_{13} \left[ \hat{0}, \left\{ \left[ \hat{1}, \hat{2} \right], \left[ \hat{3}, \rho_S \right] \right\} \right] - \eta_{02}\eta_{13} \left[ \hat{0}, \left\{ \left[ \hat{1}, \hat{2} \right], \left\{ \hat{3}, \rho_S \right\} \right\} \right] \\
& + \nu_{03}\nu_{12} \left[ \hat{0}, \left[ \left[ \hat{1}, \hat{3} \right], \left[ \hat{2}, \rho_S \right] \right] \right] + i\nu_{03}\eta_{12} \left[ \hat{0}, \left[ \left[ \hat{1}, \hat{3} \right], \left\{ \hat{2}, \rho_S \right\} \right] \right] \\
& + \eta_{03}\nu_{12} \left[ \hat{0}, \left\{ \left[ \hat{1}, \hat{3} \right], \left[ \hat{2}, \rho_S \right] \right\} \right] - \eta_{03}\eta_{12} \left[ \hat{0}, \left\{ \left[ \hat{1}, \hat{3} \right], \left\{ \hat{2}, \rho_S \right\} \right\} \right] \\
& + (\nu_{03}\nu_{12} - \eta_{03}\eta_{12}) \left[ \hat{0}, \left[ \hat{1}, \left[ \left[ \hat{2}, \hat{3} \right], \rho_S \right] \right] \right] \\
& \left. + (\nu_{03}\eta_{12} - \eta_{03}\nu_{12}) \left[ \hat{0}, \left[ \hat{1}, \left\{ \left[ \hat{2}, \hat{3} \right], \rho_S \right\} \right] \right] \right) \otimes \rho_R
\end{aligned} \tag{180}$$

### 4.3 Representação de Interação

Para a Mecânica Quântica, na "*Schödinger picture*" os operadores são fixados enquanto a equação de Schödinger altera com o tempo, pois considera os sistemas quânticos como funções de ondas com dependência temporal, neste caso, os observáveis são representados como operadores Hermitianos que atuam na função de onda. Quanto a "*Heisenberg picture*", a variação temporal é designada aos operadores, mantendo a base fixa de modo a proporcionar facilidades matemáticas e aproximação maior com a Mecânica Clássica, já a "*Interaction Figure*", também conhecida como "*Dirac picture*", é um tipo de representação intermediária entre a "*Schödinger picture*" e a "*Heisenberg picture*", pois nesse caso tanto os operadores quanto as bases estão sujeitas ao tempo, sendo assim, um caso especial de transformação unitária aplicada ao Hamiltoniano e aos auto estados. (BRUUS; FLENSBERG; PRESS, 2004)

A equação (124) em que  $H_I$  é da forma  $\sum_{k,\lambda} F_{k,\lambda} \otimes Q_{k,\lambda}$ , pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_S(t) = -\alpha^2 \sum_{k,\lambda} \sum_{k',\lambda'} \int_0^t ds \operatorname{tr}_R \left\{ Q_{k,\lambda}(t) Q_{k',\lambda'}(s) \rho_R \right\} F_{k,\lambda} F_{k',\lambda'}(s) \rho_S(t) \quad (181)$$

sendo o termo  $\rho_S$  expresso em figura de interação ("*interaction picture*"), isto é,  $\rho_S(t) = \exp^{iH_0 t} \rho_S^s \exp^{-iH_0 t}$ , de modo que, sendo  $H = H_0 + V$ , a diferencial é dada por:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S(t) &= iH_0 e^{iH_0 t} \rho_S^s(t) e^{-iH_0 t} + e^{iH_0 t} \dot{\rho}_S^s(t) e^{-iH_0 t} - e^{iH_0 t} \rho_S^s(t) iH_0 e^{-iH_0 t} \\ &= iH_0 \rho_S^s + e^{iH_0 t} (-i) [H, \rho_S^s(t)] - i \rho_S^s(t) H_0 \\ &= iH_0 \rho_S^s - i \rho_S^s(t) H_0 - i e^{iH_0 t} [H_0, \rho_S^s(t)] e^{-iH_0 t} - i e^{iH_0 t} [V, \rho_S^s(t)] e^{-iH_0 t} \\ &= iH_0 \rho_S^s - i \rho_S^s H_0 - i e^{iH_0 t} H_0 \rho_S^s(t) e^{-iH_0 t} + i e^{iH_0 t} \rho_S^s(t) H_0 e^{-iH_0 t} \\ &\quad - i e^{iH_0 t} V \rho_S^s(t) e^{-iH_0 t} + i e^{iH_0 t} \rho_S^s(t) V e^{-iH_0 t} \\ &= -i e^{iH_0 t} (V \rho_S^s(t) - \rho_S^s(t) V) e^{-iH_0 t} \end{aligned} \quad (182)$$

se  $\hat{V} = e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t}$ , tem-se

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_S &= -i (\hat{V} \rho_S^s - \rho_S^s \hat{V}) \\ &= -i [\hat{V}, \rho_S^s] \end{aligned} \quad (183)$$

isto é, a equação de *Von Neuman*.

$$\begin{aligned} \therefore \dot{\rho}_S(t) &= -i [H_0, \rho_S^s] - \alpha^2 \sum_{k,\lambda} \sum_{k',\lambda'} \int_0^t ds \operatorname{tr}_R \left\{ Q_{k,\lambda}(t) Q_{k',\lambda'}(s) \rho_R \right\} F_{k,\lambda} e^{-iH_0(t-s)} F_{k',\lambda'} \\ &\quad \cdot e^{-iH_0(t-s)} \rho_S(t) \end{aligned} \quad (184)$$

e usando as propriedades de autovalor e auto vetor descritas por  $H_0 |n\rangle = \lambda_n |n\rangle$ ,

$$\begin{aligned} \langle n | \dot{\rho}_S | m \rangle &= -i \langle n | [H, \rho_S^s] | m \rangle - \alpha^2 \sum_{k,\lambda} \sum_{k',\lambda'} \sum_{n,l_1,l_2,l_3,l_4,m} \int_0^t ds \operatorname{tr}_R \{ Q_{k,\lambda}(t) Q_{k',\lambda'}(s) \rho_R \} \\ &\quad \cdot \langle n | F_{k,\lambda} | l_1 \rangle \langle l_1 | e^{-iH_0(t-s)} | l_2 \rangle \langle l_2 | F_{k',\lambda'} | l_3 \rangle \langle l_3 | e^{-iH_0(t-s)} | l_4 \rangle \langle l_4 | \rho_S(t) | m \rangle, \end{aligned} \quad (185)$$

chamando  $\langle n | \dot{\rho}_S | m \rangle = \dot{\rho}_{n,m}$  e  $\omega_{24} = \lambda_2 - \lambda_4$ ,

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{n,m} &= -i(\lambda_n - \lambda_m) \rho_{n,m} - \alpha^2 \sum_{k,\lambda} \sum_{k',\lambda'} \sum_{l,l',m} \int_0^t ds \operatorname{tr}_R \{ Q_{k,\lambda}(t) Q_{k',\lambda'}(s) \rho_R \} e^{-i\omega_{24}(t-s)} c_n | F_{k,\lambda} | \\ &\quad \cdot | l \rangle \langle l | | F_{k',\lambda'} | | l' \rangle \rho_{l',m} \end{aligned} \quad (186)$$

## 4.4 Matrizes Pauli

O conjunto formado pelas matrizes complexa  $\mathbb{R}^2$ , hermitianas e unitárias  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$ , aliado à matriz identidade denotada por  $\sigma_0$ , formam uma base para o espaço vetorial real das matrizes em  $\mathbb{R}^2$  hermitianas. Assim, como os observáveis na Mecânica Quântica são representados por operadores hermitianos, as matrizes de Pauli geram o espaço de observáveis do espaço de Hilbert de dimensão dois (COHEN-TANNOUDI; DIU; LALOE, 1991).

No contexto dessa pesquisa, foram utilizadas as matrizes de Pauli para representar uma leitura dos  $\operatorname{tr}_R$  dos produtos dos  $Q_{i,\lambda}$  com  $\rho_R$ , para isso fez-se necessário um maior entendimento das propriedades dessas matrizes.

Seja a representação das matrizes de Pauli dadas por

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (187)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (188)$$

de modo que

$$\sigma_- = \frac{\sigma_x - i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_+ = \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (189)$$

$$\sigma_+ \sigma_- = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = n, \quad \sigma_- \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1} - n, \quad (190)$$

tem-se:

$$\sigma_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_+ |\uparrow\rangle = 0; \quad (191)$$

$$\sigma_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle; \quad (192)$$

$$(193)$$

$$\sigma_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \sigma_+ |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle; \quad (194)$$

$$\sigma_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \sigma_+ |\downarrow\rangle = 0. \quad (195)$$

Desta forma, seja  $C_{k,j} = (\sigma_z \otimes \sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_- \otimes \sigma_0 \otimes \sigma_0 \otimes \dots)$  e  $C_{k,j}^\dagger = (\sigma_z \otimes \sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_+ \otimes \sigma_0 \otimes \sigma_0 \otimes \dots)$ , tem-se-á:

$$\{C_{j,k}, C_{j,k}^\dagger\} = 1, \quad \{C_{j,k}, C_{j,l}^\dagger\} = 0, \text{ se } j \neq l. \quad (196)$$

isto é,  $\{\sigma_-, \sigma_+\} = \mathbb{1}$ ,  $\{\sigma_-, \sigma_z\} = 0$ ,  $\{\sigma_z, \sigma_+\} = 0$ .

Logo,  $\text{tr}_R \{Q_{i_0, \lambda_0} Q_{i_1, \lambda_1} Q_{i_2, \lambda_2} Q_{i_3, \lambda_3} \rho_R\}$ , pode ser reescrito como  $\text{tr}_R \{\hat{C}_{k_0} \hat{C}_{k_1}^\dagger \hat{C}_{k_2} \hat{C}_{k_3}^\dagger \rho_R\}$ , em que  $\hat{C}_k(t) = e^{-i\epsilon_k t} C_k(0)$ , ou seja,  $\text{tr}_R \{C_{k_0} C_{k_1}^\dagger C_{k_2} C_{k_3}^\dagger \rho_R\} e^{-i\epsilon_{k_0} t_0} e^{-i\epsilon_{k_1} t_1} e^{-i\epsilon_{k_2} t_2} e^{-i\epsilon_{k_3} t_3}$ .

Observe:

$$\begin{aligned} \langle \hat{C}_{k_0}^\dagger \hat{C}_{k_1} \hat{C}_{k_2}^\dagger \hat{C}_{k_3} \rangle &= (\sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_+ \otimes \sigma_0 \otimes \dots) (\sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_- \otimes \sigma_0 \otimes \dots) \\ &\quad \cdot (\sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_+ \otimes \sigma_0 \otimes \dots) (\sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_- \otimes \sigma_0 \otimes \dots) \end{aligned} \quad (197)$$

Pela hipótese de Born  $e^{-\beta n} = e^{-\beta n_1} \otimes e^{-\beta n_2} \otimes \dots = \bigoplus_i e^{-\beta n_i}$ , de modo que ao fazer  $i_0 = i_1$ ,  $i_2 = i_3$  e  $i_0 > i_2$ , em que são as posições dos  $\sigma_+$  ou  $\sigma_-$ , obtém-se

$$\begin{aligned} \text{tr}_R \{(\sigma_z \otimes \dots \otimes n_i \otimes \dots \otimes n_l \otimes \sigma_0 \otimes \dots) (\dots \otimes e^{-\beta n_i} \otimes \dots \otimes e^{-\beta n_l} \otimes \dots)\} = \\ \text{tr}_R \{\dots \otimes n_i e^{-\beta n_i} \otimes \dots \otimes n_l e^{-\beta n_l} \otimes \dots\} \end{aligned} \quad (198)$$

logo,

$$\begin{aligned} \frac{\text{tr}_R \{\dots \otimes n_i e^{-\beta n_i} \otimes \dots \otimes n_l e^{-\beta n_l} \otimes \dots\}}{\text{tr}_R \{e^{-\beta n}\}} &= \frac{\sum_{n_i}^1 (n_i e^{-\beta n_i \epsilon_i}) \sum_{n_l}^1 (n_l e^{-\beta n_l \epsilon_l})}{\sum_{n_i}^1 (e^{-\beta n_i \epsilon_i}) \sum_{n_l}^1 (e^{-\beta n_l \epsilon_l})} \\ &= \frac{(0 + e^{-\beta \epsilon_i})(0 + e^{-\beta \epsilon_l})}{(1 + e^{-\beta \epsilon_i})(1 + e^{-\beta \epsilon_l})} \\ &= \frac{1}{(1 + e^{\beta \epsilon_i})(1 + e^{\beta \epsilon_l})} \end{aligned} \quad (199)$$

Agora analisando um caso mais geral,  $\text{tr}_R \{Q_{i_0, \lambda_0} Q_{i_1, \lambda_1} Q_{i_2, \lambda_2} Q_{i_3, \lambda_3} \rho_R\}$ , em que  $Q_{i_n, \lambda_n} = \sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_{\lambda_n} \otimes \dots$  e  $\bar{\lambda}_n = -\lambda_n$ , o produto dos termos é descrito por:

$$\begin{aligned} \text{tr}_R \{(\sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_{\lambda_0} \otimes \sigma_0 \otimes \dots) (\sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_{\lambda_1} \otimes \sigma_0 \otimes \dots) (\sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_{\lambda_2} \otimes \sigma_0 \otimes \dots) \\ \cdot (\sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_{\lambda_3} \otimes \sigma_0 \otimes \dots) (e^{-\beta \sigma_+ \sigma_- \epsilon_1} \otimes e^{-\beta \sigma_+ \sigma_- \epsilon_2} \otimes \dots) \rho_R\}, \end{aligned} \quad (200)$$

na chamada representação de Jordan-Wigner.

Como  $\text{tr}_R \{A\} = \sum_{n_i} \langle n_1, n_2, \dots, n_{i_0}, \dots, n_{i_2}, \dots | A | n_1, n_2, \dots, n_{i_0}, \dots, n_{i_2}, \dots \rangle$ , em que  $|n_1, n_2, \dots, n_j\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_j\rangle$  e  $\langle n_1, n_2, \dots, n_j| = \langle n_1| \otimes \langle n_2| \otimes \dots \otimes \langle n_j|$ , obtém-se:

$$\sum_{i_0, i_2} \sum_{\lambda_0, \lambda_2} \frac{1}{z} \sum_{n_1} \langle n_1 | e^{-\beta \epsilon_1 \sigma_+ \sigma_-} | n_1 \rangle \dots \frac{\sum_{n_{i_0}} \langle n_{i_0} | \sigma_{\lambda_0} \sigma_{\bar{\lambda}_0} e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | n_{i_0} \rangle}{\sum_{n_{i_0}} \langle n_{i_0} | e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | n_{i_0} \rangle} \dots \dots \frac{\sum_{n_{i_2}} \langle n_{i_2} | \sigma_{\lambda_2} \sigma_{\bar{\lambda}_2} e^{-\beta \epsilon_{i_2} \sigma_+ \sigma_-} | n_{i_2} \rangle}{\sum_{n_{i_2}} \langle n_{i_2} | e^{-\beta \epsilon_{i_2} \sigma_+ \sigma_-} | n_{i_2} \rangle} \dots \quad (201)$$

se  $\lambda_0 = +$ ,

$$\frac{\langle 0 | \sigma_+ \sigma_- e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 0 \rangle + \langle 1 | \sigma_+ \sigma_- e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 1 \rangle}{\langle 0 | e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 0 \rangle + \langle 1 | e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 1 \rangle} = \frac{0 + e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}}{1 + e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}} = \frac{1}{1 + e^{\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}} \quad (202)$$

isto é, obtém-se a distribuição de Fermi, denotada por  $f_+(\epsilon_{i_0}) = \frac{1}{1 + e^{\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}}$ , analogamente, se  $\lambda_0 = -$ ,

$$\frac{\langle 0 | \sigma_- \sigma_+ e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 0 \rangle + \langle 1 | \sigma_- \sigma_+ e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 1 \rangle}{\langle 0 | e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 0 \rangle + \langle 1 | e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 1 \rangle} = \frac{1 + 0}{1 + e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}} = \frac{e^{\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}}{1 + e^{\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}} \quad (203)$$

que é denotado por  $f_-(\epsilon_{i_0}) = \frac{e^{\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}}{1 + e^{\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}}$ , sendo  $f_- = 1 - f_+$ .

Disso segue, omitindo os exponenciais que surgiram na transformação para a representação de *Schrödinger*,

$$\sum_{i_0, i_2} \sum_{\lambda_0, \lambda_2} f_{\lambda_0}(\epsilon_{i_0}) f_{\lambda_2}(\epsilon_{i_2}) \quad (204)$$

Assim, caso  $i_0 = i_2$  e  $i_1 = i_3$ , para  $i_0 > i_1$ , terá:

$$(\sigma_0 \otimes \dots \otimes \sigma_{\lambda_0} \sigma_z \sigma_{\lambda_2} \sigma_z \otimes \dots \otimes \sigma_0 \sigma_{\lambda_1} \sigma_0 \sigma_{\lambda_3} \otimes \sigma_0 \otimes \dots) (e^{-\beta \epsilon_1 \sigma_+ \sigma_-} \otimes \dots \otimes e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} \otimes \dots \otimes e^{-\beta \epsilon_{i_1} \sigma_+ \sigma_-} \otimes \dots) \quad (205)$$

para  $i_0$ , se  $\lambda_0 = +$

$$\frac{\langle 0 | \sigma_+ \sigma_z \sigma_- \sigma_z e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 0 \rangle + \langle 1 | \sigma_+ \sigma_z \sigma_- \sigma_z e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 1 \rangle}{\langle 0 | e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 0 \rangle + \langle 1 | e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-} | 1 \rangle} = \frac{0 - e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}}{1 + e^{-\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}} = \frac{-1}{1 + e^{\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}} \quad (206)$$

isto é, obtém-se novamente a distribuição de Fermi, denotada também por  $f_+(\epsilon_{i_0}) = \frac{1}{1 + e^{\beta \epsilon_{i_0} \sigma_+ \sigma_-}}$ , note que neste caso houve a adição de um termo  $(-1)$ , que refere-se a primeira permutação ocorrida, como é de se esperar, obtém-se o mesmo resultado para  $f_-$ .

De modo semelhante, para  $i_1$ , se  $\lambda_0 = +$

$$\frac{\langle 0 | \sigma_0 \sigma_+ \sigma_0 \sigma_- e^{-\beta \epsilon_{i_1} \sigma_+ \sigma_-} | 0 \rangle + \langle 1 | \sigma_0 \sigma_+ \sigma_0 \sigma_- e^{-\beta \epsilon_{i_1} \sigma_+ \sigma_-} | 1 \rangle}{\langle 0 | e^{-\beta \epsilon_{i_1} \sigma_+ \sigma_-} | 0 \rangle + \langle 1 | e^{-\beta \epsilon_{i_1} \sigma_+ \sigma_-} | 1 \rangle} = \frac{0 + e^{-\beta \epsilon_{i_1} \sigma_+ \sigma_-}}{1 + e^{-\beta \epsilon_{i_1} \sigma_+ \sigma_-}} = \frac{1}{1 + e^{\beta \epsilon_{i_1} \sigma_+ \sigma_-}} \quad (207)$$

resultando também na função de Fermi, com  $f_- = 1 - f_+$ .

$$\therefore - \sum_{i_0, i_1} \sum_{\lambda_0, \lambda_1} f_{\lambda_0}(\epsilon_{i_0}) f_{\lambda_1}(\epsilon_{i_1}), \quad (208)$$

e para  $i_0 = i_3$  e  $i_1 = i_2$ , com  $i_0 > i_1$

$$\sum_{i_0, i_1} \sum_{\lambda_0, \lambda_1} f_{\lambda_0}(\epsilon_{i_0}) f_{\lambda_1}(\epsilon_{i_1}). \quad (209)$$

É importante ressaltar que nesta pesquisa foi feito a reprodução dos cálculos para o caso em que  $i_0 = i_1 = i_2 = i_3$  e verificado que o resultado é sempre zero.

## 4.5 Fórmula de Baker-Hausdorff

Dado dois operadores Hermitianos  $A$  e  $B$  no espaço  $\mathcal{H}$ ,  $e^{iG\lambda} A e^{-iG\lambda} = A + i\lambda [G, A] + \frac{(i\lambda)^2}{2!} [G [G, A]] + \dots$ , em que  $\lambda$  é um operador  $\in \mathbb{R}$ .

*Demonstração.*

$$\begin{aligned} & \left[ \mathbb{1} + \frac{iG\lambda}{1!} + \frac{(iG\lambda)^2}{2!} + \frac{(iG\lambda)^3}{3!} + \dots \right] A \left[ \mathbb{1} - \frac{iG\lambda}{1!} + \frac{(iG\lambda)^2}{2!} + \frac{(iG\lambda)^3}{3!} - \dots \right] = \\ & A + (iG\lambda)A\mathbb{1} - \mathbb{1}A(iG\lambda) + \frac{(iG\lambda)^2}{2}A\mathbb{1} - \mathbb{1}\frac{(iG\lambda)^2}{2}A(iG\lambda) + (iG\lambda)A\frac{(iG\lambda)^2}{2} + \dots = \\ & A + i\lambda [G, A] + \frac{(i\lambda)^2}{2!} [G, A [G, A]] + \dots \end{aligned} \quad (210)$$

cqd. □

Utilizando a fórmula é possível tratar das equação que envolvem a técnica TCL. Então, seja  $e^{i\epsilon_{i_0} t_0} Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0} Q_{i_0, \lambda_0} e^{-i\epsilon_{i_0} t_0} Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0} = Q_{i_0, \lambda_0} e^{i\lambda_0 \epsilon_{i_0} t_0}$ , ter-se-á:

$$Q_{i_0, \lambda_0} + i\epsilon_{i_0} t_0 [Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0}, Q_{i_0, \lambda_0}] + \frac{(i\epsilon_{i_0} t_0)^2}{2!} [Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0}, [Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0}, Q_{i_0, \lambda_0}]] + \dots \quad (211)$$

e usando o comutador para  $\lambda_0 = +$ ,

$$[Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0}, Q_{i_0}^\dagger] = Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0} Q_{i_0}^\dagger - Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0} \quad (212)$$

em que  $\{Q_i, Q_j\} = 0$  e  $\{Q_i^\dagger, Q_j\} = \delta_{i,j}$ , isto é,

$$[Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0}, Q_{i_0}^\dagger] = Q_{i_0}^\dagger (\mathbb{1} - Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0}) - Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0} = Q_{i_0}^\dagger, \quad (213)$$

já quanto ao comutador para  $\lambda_0 = -$ ,

$$[Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0}, Q_{i_0}] = - (Q_{i_0}^\dagger)^\dagger = -Q_{i_0} \quad (214)$$

$$\therefore [Q_{i_0}^\dagger Q_{i_0}, Q_{i_0, \lambda_0}] = \lambda_0 Q_{i_0, \lambda_0}. \quad (215)$$

Em retorno ao problema original, com a adição de uma integração com relação a energia, obtém-se a seguinte equação que pode ser solucionada via *Método de Resíduos* em Física Matemática, que para  $f_+$ , resulta em :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon J(\epsilon) f_+(\epsilon) e^{i\epsilon(t-t_3)} = 2\pi i \sum_n \left(-\frac{1}{\beta}\right) e^{i\omega_n(t-t_3)} \quad (216)$$

em que  $f_+(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\epsilon_F)+1}}$ ,  $\beta = \frac{1}{\kappa_B T}$  e  $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$  conhecido como *frequência de Matsubara*.

Dado uma gaussiana que permite avaliar a largura do espectro denotada por  $J(\epsilon)$ , tem-se:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon J(\epsilon) f_+(\epsilon) e^{i\epsilon(t_i-t_j)} = -\frac{2\pi i}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} J(z_n + \mu) e^{i(z_n+\mu)(t_i-t_j)} \quad (217)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon J(\epsilon) f_-(\epsilon) e^{-i\epsilon(t_i-t_j)} = -\frac{2\pi i}{\beta} \sum_{m=0}^{\infty} J(-z_m + \mu) e^{i(z_m-\mu)(t_i-t_j)} \quad (218)$$

em que  $z$  e  $\mu$  é a *frequência de Matsubara*

Assim, pode-se escrever

$$\begin{aligned} \left(-\frac{2\pi i}{\beta}\right)^2 \sum_{n,m,\lambda_0,\lambda_2}^{\infty} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 J(\bar{\lambda}_0 z_n + \mu) J(\bar{\lambda}_0 z_m + \mu) \\ \cdot e^{i(z_n-\bar{\lambda}_0\mu)(t_0-t_1)} e^{i(z_m-\mu)(t_2-t_3)} F_{l_0,\lambda_0} F_{l_0,\bar{\lambda}_0} F_{l_2,\lambda_2} F_{l_2,\bar{\lambda}_2} \rho_R, \end{aligned} \quad (219)$$

resultando em

$$\begin{aligned} \left(-\frac{2\pi i}{\beta}\right)^2 \sum_{n,m,\lambda_0,\lambda_2}^{\infty} \sum_{n_1,n_2,n_3}^{\infty} \sum_{n_4,n_5,n_6}^{\infty} e^{i(z_n+\bar{\lambda}_0\mu+\lambda_{n_1}-\lambda_{n_5})t} |n_1\rangle \langle n_6| \rho_{n_5,n_6} \\ \frac{F_{l_0,\lambda_0,n_1,n_2} F_{l_0,\bar{\lambda}_0,n_2,n_3} F_{l_2,\lambda_2,n_3,n_4} F_{l_2,\bar{\lambda}_2,n_4,n_5}}{i(\lambda_{n_4}-\lambda_{n_5}-z_m-\bar{\lambda}_2\mu)} \left[ \frac{e^{i(-\lambda_{n_5}+\lambda_{n_2}-z_n-\bar{\lambda}_0\mu)t-1}}{i^2(-\lambda_{n_5}+\lambda_{n_2}-z_n-\bar{\lambda}_0\mu)(-\lambda_{n_5}+\lambda_{n_3})} \right. \\ \frac{e^{i(\lambda_{n_2}-\lambda_{n_3}-z_n-\bar{\lambda}_0\mu)t-1}}{i^2(\lambda_{n_2}-\lambda_{n_3}-z_n-\bar{\lambda}_0\mu)(-\lambda_{n_5}+\lambda_{n_3})} - \frac{e^{i(-\lambda_{n_4}+\lambda_{n_2}+z_m-z_n-\bar{\lambda}_0\mu-\bar{\lambda}_2\mu)t-1}}{i^2(-\lambda_{n_4}+\lambda_{n_2}+z_m-z_n-\bar{\lambda}_0\mu-\bar{\lambda}_2\mu)(z_m+\bar{\lambda}_2\mu+\lambda_{n_3}-\lambda_{n_4})} \\ \left. - \frac{e^{i(\lambda_{n_2}-\lambda_{n_3}-z_n-\bar{\lambda}_0\mu)t-1}}{i^2(\lambda_{n_2}-\lambda_{n_3}-z_n-\bar{\lambda}_0\mu)(z_m+\bar{\lambda}_2\mu+\lambda_{n_3}-\lambda_{n_4})} \right] \end{aligned} \quad (220)$$

a qual se trata da equação em que o projeto tem em vista a construção de um programa em Python que a solucione  $\forall t \in \mathbb{R}$ .

Nesta etapa da pesquisa é executado o processo de elaboração de tal programa computacional pela implementação da técnica TCL, a qual devido a grande complexidade, não se encontra concluído. Sendo assim, os esforços dos envolvidos se mantêm até que a implementação seja finalizada, aliado aos estudos sobre lógica, programação em Python e Redes Neurais, inspirado no recente artigo "*Modelling non-markovian quantum processes with recurrent neural networks*" (BANCHI et al., 2018).



## Implementação do Gradiente Descendente

A partir da equação (19), que representa a média de todos os cálculos da função de custo amostra por amostra, o gradiente descendente vetorizado

$$W^{(l)} = W^{(l)} - \alpha \left[ \frac{1}{m} \sum_{z=1}^m \frac{\partial}{\partial W^{(l)}} J(w, b, x^{(z)}, y^{(z)}) \right] \quad (221)$$

condensa a versão de cálculo elemento por elemento otimizado o processo, mas a medida que se avança nos lotes de treinamento surge a necessidade da produção de um termo que resuma as derivadas parciais dos cálculos da função de custo da amostra individual, o qual é denominado  $\Delta W^{(l)}$  e analogamente para o gradiente do bias  $b$  o  $\Delta b^{(l)}$ , de modo que a cada interação de amostra do algoritmo de treinamento final, deve-se realizar:

$$\Delta W^{(l)} = \Delta W^{(l)} + \frac{\partial}{\partial W^{(l)}} J(w, b, x^{(z)}, y^{(z)}) \quad (222)$$

$$= \Delta W^{(l)} + \delta^{(l+1)} (h^{(l)})^T \quad (223)$$

$$\Delta b^{(l)} = \Delta b^{(l)} + \delta^{(l+1)} \quad (224)$$

que após todas as interações é construído os somatórios presentes no gradiente descendente e, por conseguinte, é atualizado os parâmetros de peso:

$$W^{(l)} = W^{(l)} - \alpha \left[ \frac{1}{m} \Delta W^{(l)} \right] \quad (225)$$

$$b^{(l)} = b^{(l)} - \alpha \left[ \frac{1}{m} \Delta b^{(l)} \right]. \quad (226)$$



---

## Elaboração do Algoritmo de RN

O algoritmo de *Feed-Forward* é um método inspirado nas células nervosas do cérebro, em que neurônios recebem sinais de entrada através dos dendritos, enquanto os axônios transmitem o sinal para as sinapses, a qual é a região onde agem os neurotransmissores transmitindo o impulso nervoso de um neurônio a outro. Neste caso, para simular este processo, na abordagem da retropropagação, uma função modifica as ponderações internas dos pesos dos sinais do *input* para produzir um sinal de *output* esperado, isto é, a aprendizagem é supervisionada, pois a rede balanceia seus pesos buscando minimizar o erro entre a camada do *output* do sistema e o valor de saída esperado.

Para realizar o processo é preciso inicializar a rede e executar a propagação para a frente, ou seja, o feed-forward, propagando um sinal de entrada através de cada camada até que a camada de saída produza seus valores, que representa o equivalente à transmissão sináptica de sinal realizada pelos neurotransmissores que provoca a ativação dos neurônios. Em seguida, o erro é calculado entre as saídas esperadas e as saídas propagadas a partir da rede, sendo a partir disso propagados para trás, partindo da camada do output em direção às camadas mais internas escondidas na rede, balanceando os pesos sinápticos à medida que retrocedem internamente.

A partir disso, a rede é treinada usando descida de gradiente estocástico, enquanto os pesos sinápticos e de polarização são atualizados conforme um critério de parada determinado por uma precisão desejada, e com isso, passa a ser capaz de prever retornando o índice na saída da rede que tem a maior probabilidade.

Em seguida apresentaremos o fluxograma (Figura 10) do esquema de funcionamento da técnica de retropropagação para implementação, cuja rotina do gradiente descendente é repetida até que o critério de parada seja atingido, isto é, quando a função de custo médio tenha alcançado um mínimo ideal, para o qual a Rede Neural é considerada treinada e apta ao uso.

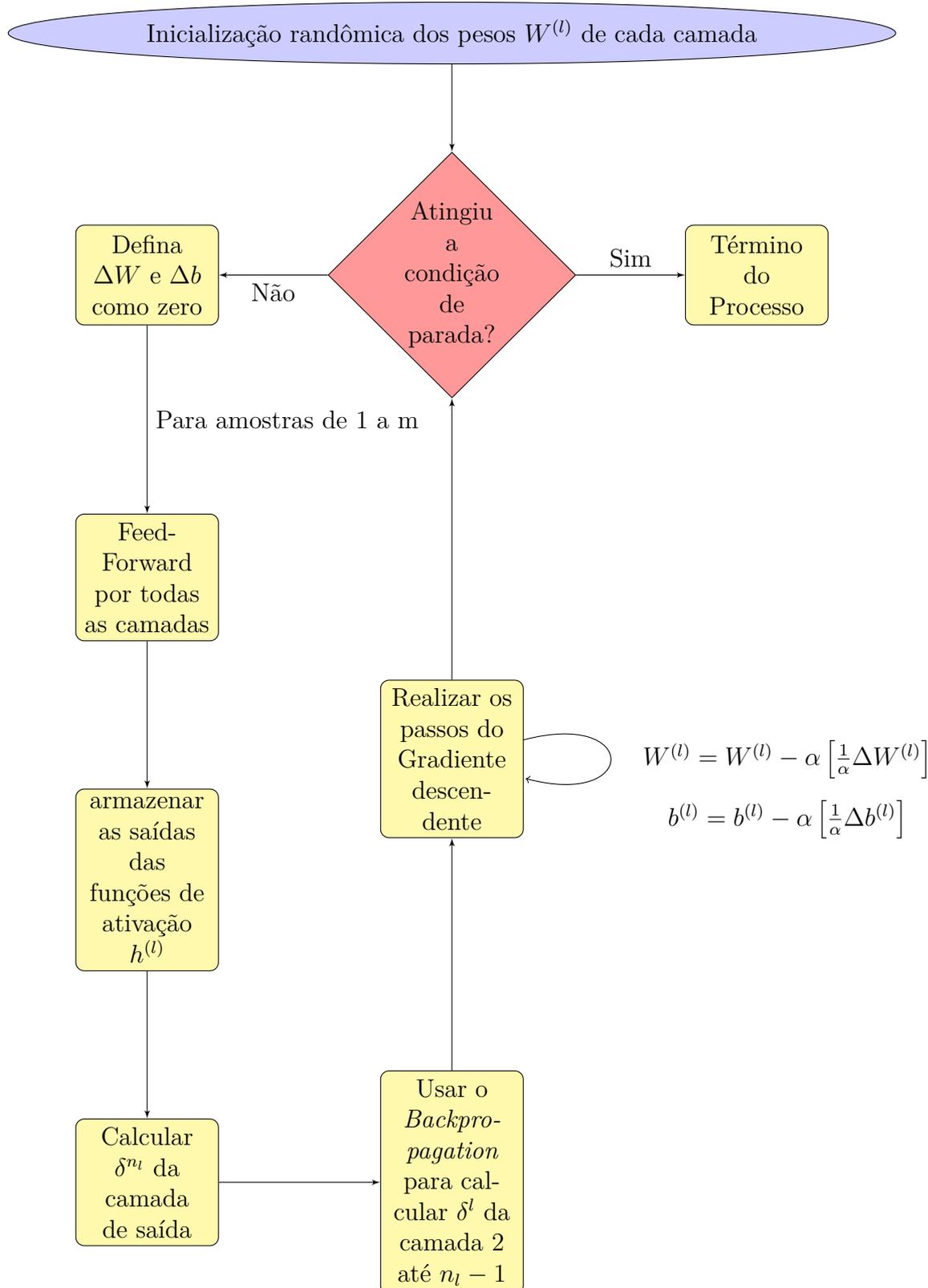


Figura 10 – Fluxograma produzido em Tikz do algoritmo de Redes Neurais.

No algoritmo a seguir, é implementado um código para treinar uma RN que reconhece dígitos escritos à mão (THOMAS, 2017), utilizando o banco de dados de dígitos manuscritos MNIST da biblioteca Scikit-Learn, comumente usado para treinar vários sistemas

de processamento de imagem. Então, aplicamos o RN para desenvolver um código que realiza o treinamento e previsão neste conjunto de dados para identificar o dígito.

Como por exemplo identificar que todas as imagens a seguir representam o dígito 1:

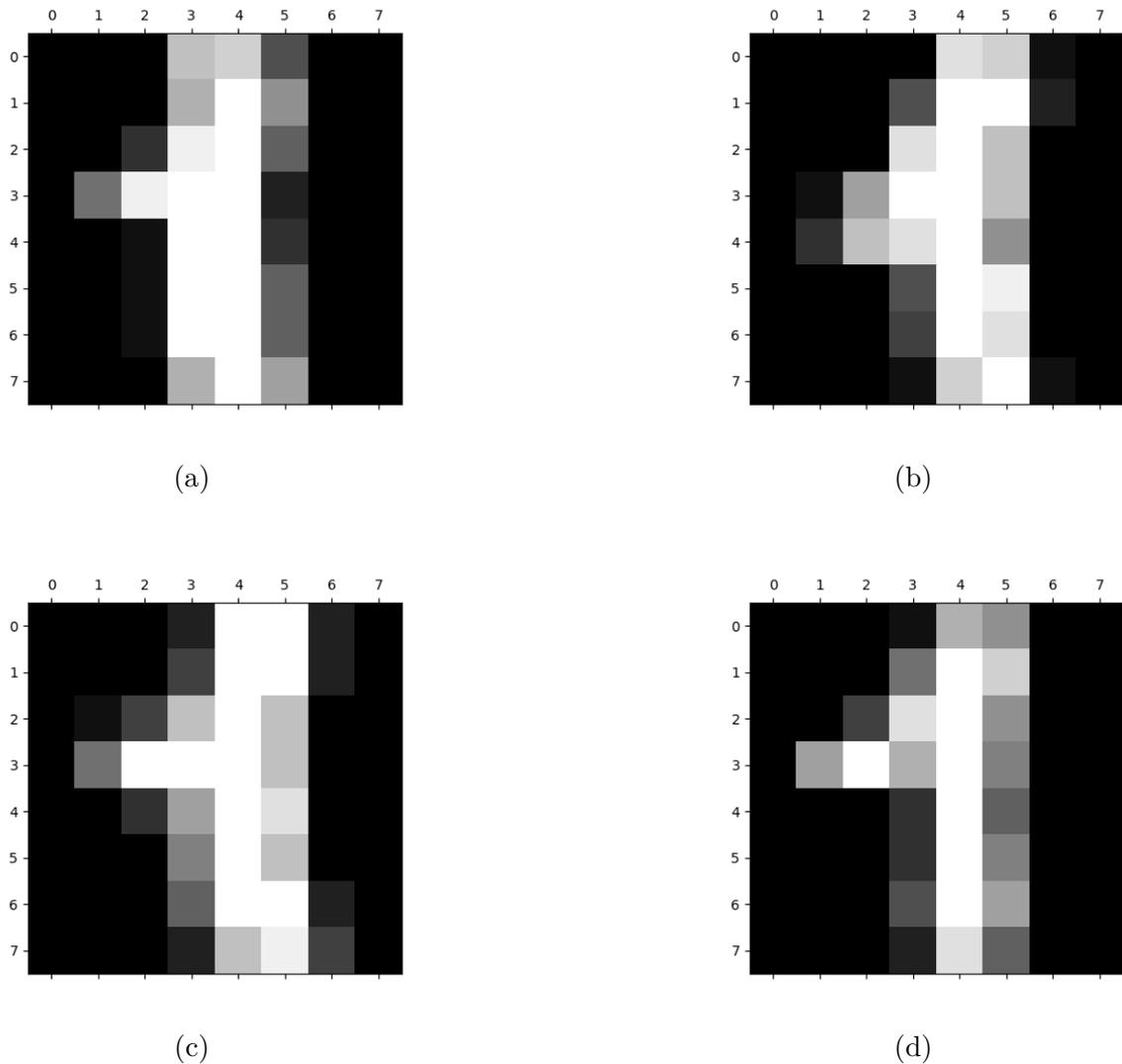


Figura 11 – Dígitos 1 gerados pelo MNIST onde cada imagem tem 8 x 8 pixels de tamanho, e a amostra de dados da imagem é representada por 64 pontos de dados que denotam a intensidade do pixel.

Para a implementação da RN em Python é necessário importar bibliotecas como a *NumPy*, pois devido a vetorização é necessário o uso de uma biblioteca que suporta o processamento de grandes, multi-dimensionais arranjos e matrizes, bem como a *Scikit-Learn*, que se trata de uma biblioteca de aprendizado de máquina de código aberto para a linguagem de programação Python, além da *matplotlib*, para a produção de plot de figuras.

```

1 import numpy as np
  import numpy.random as r
3 import matplotlib.pyplot as plt

```

```

from sklearn.datasets import load_digits
5 from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.metrics import accuracy_score

```

A `load_digits()` ajuda a carregar e retornar o conjunto de dados de dígitos, esta classificação contém pontos de dados, onde cada ponto de dados é uma imagem 8X8 de um único dígito. Enquanto, a biblioteca Scikit-Learn dimensiona os dados de entrada subtraindo a média e dividindo pelo desvio padrão, para que caibam em um intervalo pequeno centrado em torno de 0, normalizando os dados para facilitar a convergência da Rede Neural.

```

digits = load_digits()
2 X_scale = StandardScaler()
X = X_scale.fit_transform(digits.data)
4 X[0,:]

```

Neste processo é reservado 40% do conjunto de dados para teste e os outros 60% para o aprendizado supervisionado.

```

y = digits.target
2 X_train, X_test, y_train, y_test= train_test_split(X,y, test_size=0.4)

```

Para que o algoritmo seja capaz de prever o dígito é intuitivo que na camada de saída existam 10 nós representando os n dígitos de 0 a 9. Deste modo, a rede deve ser treinada para identificar o dígito que lhe foi apresentado obtendo a maior saída para o dígito mais provável, sendo assim, para uma saída do tipo [0.01, 0.1, 0.2, 0.05, 0.3, 0.8, 0.4, 0.03, 0.25, 0.02] cujo índice máximo é de 0.8 na posição n=5, simboliza que o dígito previsto é o "5".

Neste contexto, para otimizar a estrutura escalar dos dados MNIST fornecidos, é necessário convertê-los na forma de um vetor para que ele se aline com a camada de saída de 10 nós, como mostrado a seguir:

```

def convert_y_to_vect(y):
2   y_vect = np.zeros((len(y),10))
   for i in range(len(y)):
4     y_vect[i,y[i]] = 1
   return y_vect
6
y_v_train = convert_y_to_vect(y_train)
8 y_v_test = convert_y_to_vect(y_test)
y_train[0],y_v_train[0]
10 nn_structure = [64,30,10]

```

Assim que o neurônio é ativado, para transferir a ativação para identificar a saída do neurônio é implementado a função sigmóide como função de transferência juntamente com sua derivada:

```

1 def f(x):
2     return 1/(1+np.exp(-x))
4 def f_deriv(x):
5     return f(x)*(1-f(x))

```

A primeira etapa de execução da Rede Neural como ilustrado na Figura 10 é a inicialização dos pesos com valores aleatórios para garantir a convergência durante o treinamento a partir da função *random\_sample* da biblioteca NumPy. Sendo assim, os pesos das conexões e das polarizações são inicializados para cada camada utilizando objetos de dicionário Python facilitando a organização entre camadas.

```

1 def setup_and_init_weights(nn_structure):
2     W = {}
3     b = {}
4     for l in range(1, len(nn_structure)):
5         W[l] = r.random_sample((nn_structure[l], nn_structure[l-1]))
6         b[l] = r.random_sample((nn_structure[l],))
7     return W, b

```

Em seguida, é definido os valores de  $\Delta W$  e  $\Delta b$  como zero e desenvolvido a função que calcula o  $\Delta W$  e  $\Delta b$ , como expresso pelas equações (223) e (224):

```

1 def init_tri_values(nn_structure):
2     tri_W = {}
3     tri_b = {}
4     for l in range(1, len(nn_structure)):
5         tri_W[l] = np.zeros((nn_structure[l], nn_structure[l-1]))
6         tri_b[l] = np.zeros((nn_structure[l],))
7     return tri_W, tri_b

```

Seguindo o fluxograma da Figura 10, nesta etapa é construído o processo de Feed-Forward através da rede:

```

1 def feed_forward(x, W, b):
2     h = {1:x}
3     z = {}
4     for l in range(1, len(W)+1):
5         if l == 1:
6             node_in = x

```

```

7     else :
          node_in = h[1]
9     z[1+1] = W[1].dot(node_in) + b[1]
          h[1+1] = f(z[1+1])
11    return h, z

```

Após a execução do Feed-Forward, as saídas das funções de ativação  $h^l$  são armazenadas, o  $\delta^{(n_l)}$  da camada de saída é calculado, enquanto os  $\delta^{(l)}$  das camadas escondidas são calculados através da retropropagação da camada 2 até a  $n_l - 1$ :

```

1 def calculate_out_layer_delta(y, h_out, z_out):
    return -(y-h_out)*f_deriv(z_out)
3
5 def calculate_hidden_delta(delta_plus_1, w_1, z_1):
    return np.dot(np.transpose(w_1), delta_plus_1)*f_deriv(z_1)
7
9 def train_nn(nn_structure, X, y, iter_num=3000, alpha=0.25):
    W, b = setup_and_init_weights(nn_structure)
    cnt = 0
    m = len(y)
    avg_cost_func = []
    print('Starting gradient descent for {} iterations'.format(iter_num))
    while cnt < iter_num:
        if cnt%1000 == 0:
            print('Iteration {} of {}'.format(cnt, iter_num))
            tri_W, tri_b = init_tri_values(nn_structure)
            avg_cost = 0
            for i in range(len(y)):
                delta = {}
                # fazendo o feed forward e retornando os valores de h e z armazenados
                # para serem usados
                # passos do gradiente descendente
                h, z = feed_forward(X[i, :], W, b)
                # loop de nl-1 at 1 propagando os erros para tr s
                for l in range(len(nn_structure), 0, -1):
                    if l == len(nn_structure):
                        delta[l] = calculate_out_layer_delta(y[i, :], h[l], z[l])
                        avg_cost += np.linalg.norm((y[i, :] - h[l]))
                    else:
                        if l > 1:
                            delta[l] = calculate_hidden_delta(delta[l+1], W[l], z[l])
                            tri_W[l] += np.dot(delta[l+1][:, np.newaxis], np.transpose(h[l][:,
                                np.newaxis]))
                            tri_b[l] += delta[l+1]
                #executa a etapa de descida do gradiente para os pesos em cada camada
                for l in range(len(nn_structure) - 1, 0, -1):

```

```

35     W[1] += -alpha*(1.0/m*tri_W[1])
      b[1] += -alpha*(1.0/m*tri_b[1])
37     # media completa de J
      avg_cost =1.0/m*avg_cost
39     avg_cost_func.append(avg_cost)
      cnt += 1
41     return W,b, avg_cost_func
43 W,b,avg_cost_func = train_nn(nn_structure ,X_train ,y_v_train)

```

Encerrado este processo, os pesos  $W$  e  $b$  treinados são atualizados acompanhados da função de custo média rastreada para cada iteração.

Por fim, apresentaremos um plot da relação entre a função de custo média com o número de iterações, mostrando como esta função converge para um mínimo na função:

```

1 plt.plot(avg_cost_func)
  plt.ylabel(' J Medio ')
3 plt.xlabel('Numero de interecoos')
  plt.show()

```

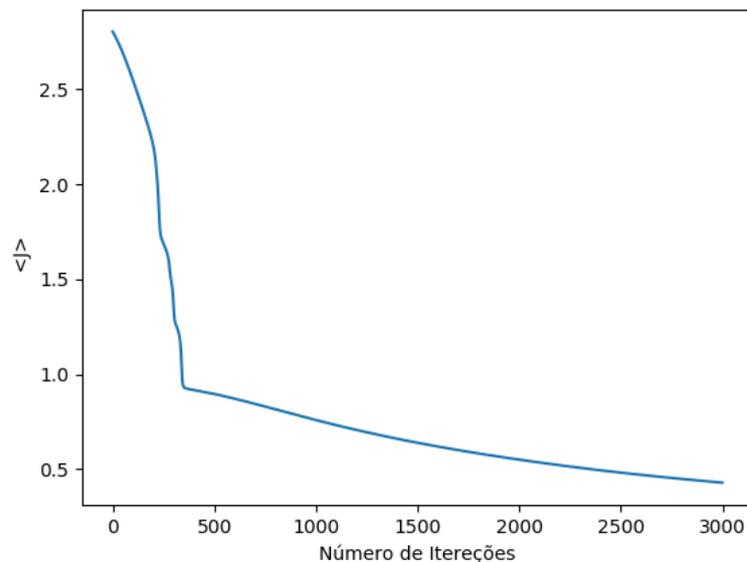


Figura 12 – Plot da função de custo média pelo número de iterações, no qual é possível perceber que a partir de um certo valor de iterações, próximo de 500, qualquer aumento adicional não produz melhoras significativas no desempenho da rede.

Por fim, testamos aptidão da rede realizando o Feed-Forward para verificar o treinamento dos pesos sinápticos e das polarizações na obtenção de um previsão correta na

camada de *output*, tomando como o dígito previsto, o nó com o maior valor de saída, dado pela função `numpy.argmax`:

```
def predict_y(W,b,X,n_layers):
2   m = X.shape[0]
   y = np.zeros((m,))
4   for i in range(m):
       h ,z = feed_forward(X[i ,:], W,b)
6       y[i] = np.argmax(h[n_layers])
   return y
8 print('y=',y)

10 y_pred= predict_y(W,b,X_test,3)
   accuracy_score(y_test , y_pred)*100
12 print('Precisao=',accuracy_score(y_test , y_pred)*100)
```

onde obtivemos `y= [0 1 2 ... 8 9 8]` com uma precisão satisfatória de 86.93%.

---

## Conclusão

Tendo em vista tal dificuldade, bem como a escassez na literatura sobre o estudo de dinâmica não-markoviana mais pormenorizada, a partir da leitura do recente artigo "*Modelling non-markovian quantum processes with recurrent neural networks*" (BANCHI et al., 2018), surgiu a ideia de realizar este estudo utilizando redes neurais, desenvolvendo um tratamento mais detalhado dos cálculos envolvidos em processos não-markovianos, que pela dificuldade de se encontrar material de estudo mais detalhado, torna o processo de aprendizagem mais lento. Desta forma, embora o objetivo final de realizar o tratamento da dinâmica não-markoviana via Redes Neurais não tenha sido alcançado, este estudo apresenta-se como uma importante contribuição para alunos que tenham interesse em estudar dinâmica não-markoviana devido ao grau de detalhamento apresentado, representando um caminho entre o formalismo da dinâmica não-markoviana e das Redes Neurais, destacando-se se o resultado inédito obtido na equação (220) que será de extrema importância aos futuros estudos na continuação desta pesquisa.

### 7.1 Trabalhos Futuros

A partir deste estudo de Redes Neurais e da dinâmica não markoviana a perspectiva é de juntar as duas partes, tendo como interesse, utilizar redes neurais para aprender a evolução de estados quânticos, isto é, assumindo que não há conhecimento sobre o Hamiltoniano e a interação com o meio ambiente, e a partir de um conjunto de dados, encontrar um modelo efetivo que governa a dinâmica do sistema quântico aberto.



---

## Referências

- BANCHI, L. et al. Modelling non-markovian quantum processes with recurrent neural networks. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 20, n. 12, p. 123030, 2018.
- BENIOFF, P. The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical hamiltonian model of computers as represented by turing machines. **Journal of Statistical Physics**, v. 22, p. 563–591, 1980. ISSN 1572-9613.
- BEREZOVSKY, J. et al. Nondestructive optical measurements of a single electron spin in a quantum dot. **Science**, v. 314, n. 5807, p. 1916–1920, 2006.
- BEREZOVSKY M. H. MIKKELSEN, N. G. S. J.; COLDREN, L. A.; AWSCHALOM, D. D. Picosecond coherent optical manipulation of a single electron spin in a quantum dot. **Science**, v. 320, n. 5874, p. 349–352, 2008.
- BREUER, H.; PETRUCCIONE, F. **The Theory of Open Quantum Systems**. [S.l.]: OUP Oxford, 2007. ISBN 9780199213900.
- BRUUS, H.; FLENSBERG, K.; PRESS, O. U. **Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction**. OUP Oxford, 2004. (Oxford Graduate Texts). ISBN 9780198566335. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=CktuBAAAQBAJ>>.
- COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum Mechanics**. Wiley, 1991. (Quantum Mechanics, v. 1). ISBN 9780471164333. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=iHcpAQAAMAAJ>>.
- COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum Mechanics, Volume 1: Basic Concepts, Tools, and Applications**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2019.
- DATTA, S. **Quantum transport: atom to transistor**. [S.l.]: Cambridge university press, 2005.
- DELGADO-GARCÍA, J. M. Cajal and the conceptual weakness of neural sciences. **Frontiers in Neuroanatomy**, Frontiers Media SA, v. 9, p. 128, 2015.
- EPSTEIN, J. M. Generative social science. In: **Generative Social Science**. [S.l.]: Princeton University Press, 2012.
- FACELI, K. et al. **Inteligência artificial: uma abordagem de aprendizado de máquina**. [S.l.]: LTC, 2011.

FERNANDEZ, N.; BREATHNACH, C. S. Luis simarro lacabra [1851–1921]: from golgi to cajal through simarro, via ranvier. **Journal of the History of the Neurosciences**, Taylor & Francis, v. 10, n. 1, p. 19–26, 2001.

FERNEDA, E. Redes neurais e sua aplicação em sistemas de recuperação de informação. **Ciência da Informação**, v. 35, 08 2006.

FEYNMAN, R. P. Simulating physics with computers. **International Journal of Theoretical Physics**, v. 21, p. 467–488, 1982. ISSN 1572-9575.

FRANCO, N. **Cálculo numérico**. [S.l.]: Pearson, 2006. ISBN 9788576050872.

IHN, T. **Semiconductor Nanostructures: Quantum states and electronic transport**. [S.l.]: Oxford university press, 2010.

J., E. et al. Single-shot read-out of an individual electron spin in a quantum dot. **Nature**, v. 430, p. 431–435, 07 2006.

KANDEL, E. et al. **Princípios de neurociências-5**. [S.l.]: AMGH Editora, 2014.

KANDEL, E. R. **Em busca da memória: o nascimento de uma nova ciência da mente**. [S.l.]: Companhia das Letras, 2021.

KNILL, E. Quantum computing. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 463, n. 7280, p. 441–443, 2010.

LEONARD, J.; KRAMER, M. A. Improvement of the backpropagation algorithm for training neural networks. **Computers & Chemical Engineering**, Elsevier, v. 14, n. 3, p. 337–341, 1990.

LIU, B.-H. et al. Experimental control of the transition from markovian to non-markovian dynamics of open quantum systems. **Nature Physics**, Springer Science and Business Media LLC, v. 7, n. 12, p. 931–934, Sep 2011. ISSN 1745-2481. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nphys2085>>.

LOSS, D.; DIVINCENZO, D. P. Quantum computation with quantum dots. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 57, p. 120–126, Jan 1998. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.57.120>>.

MCCULLOCH, W. S.; PITTS, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. **The bulletin of mathematical biophysics**, Springer, v. 5, n. 4, p. 115–133, 1943.

MOORE, G. Cramming more components onto integrated circuits. **Electronics**, v. 38, n. 8, p. 114, 1965.

NAKAHARA, M. **Quantum computing: from linear algebra to physical realizations**. [S.l.]: CRC press, 2008.

NASCIMENTO, I. **Rede Neural Simples**. [S.l.]: Reprodução artística de Isabelle Teodoro Nascimento, 2022.

NASCIMENTO, I. T. **Desenho das células de Purkinje e células granulares do cerebelo do pombo, 1899 Santiago Ramón y Cajal, Madrid, Espanha**. [S.l.]: Reprodução artística de Isabelle Teodoro Nascimento, 2022.

NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. Quantum computation and quantum information. **Phys. Today**, v. 54, n. 2, p. 60, 2001.

PETTA, J. R. et al. Coherent manipulation of coupled electron spins in semiconductor quantum dots. **Science**, v. 309, p. 2180, 9 2005. Disponível em: <[link.gale.com/apps/doc/A137627153/AONE?u=anon~3394a558&sid=bookmark-AONE&xid=24752d7f](http://link.gale.com/apps/doc/A137627153/AONE?u=anon~3394a558&sid=bookmark-AONE&xid=24752d7f)>.

RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning representations by back-propagating errors. **nature**, Nature Publishing Group, v. 323, n. 6088, p. 533–536, 1986.

SIMPSON, J. **Dicionário Oxford escolar para estudantes brasileiros de inglês: português-inglês/inglês-português**. [S.l.]: Oxford University Press, 2009. ISBN 9780194419512.

THOMAS, A. **An introduction to neural networks for beginners**. [S.l.], 2017.

XU, Z.-Y. et al. Non-markovian effect on remote state preparation. **Annals of Physics**, v. 356, p. 29–36, 2015. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491615000779>>.

ZHANG, W.-M. et al. General non-markovian dynamics of open quantum systems. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 109, p. 170402, Oct 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.170402>>.