



Oumaima El Jaafari, Arina Ivanova,
Paul Minodier, Marco Paina et Jonas
Wehrung-Montpezat

Avril 2023

PHY14 : SIMULATION DE MARCHES ALÉATOIRES QUANTIQUES À L'AIDE DE CONDENSATS D'ATOMES FROIDS

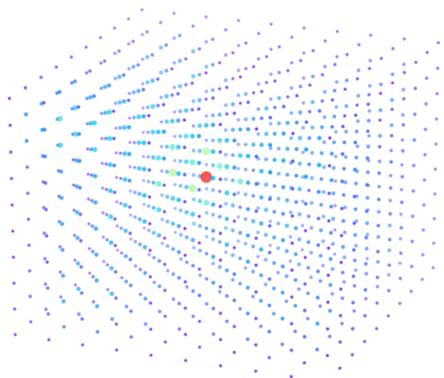
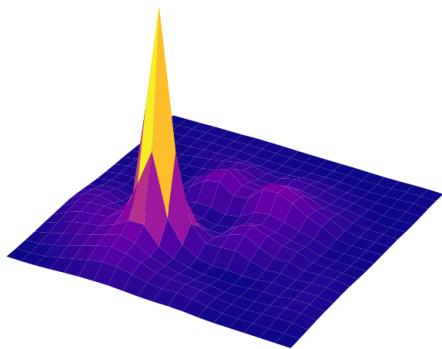


Table des matières

1 Introduction	3
1.1 Motivation du sujet	3
1.2 Résumé	4
2 Présentation du formalisme	4
2.1 Différents types de marches	4
2.1.1 Marche aléatoire classique discrète (DTRW)	4
2.1.2 Marche aléatoire classique continue (CTRW)	4
2.1.3 Marche aléatoire quantique discrète (DTQW)	5
2.1.4 Marche aléatoire quantique continue (CTQW)	5
2.2 Exemples et comparaisons	6
2.2.1 DTRW et DTQW	6
2.2.2 CTRW et CTQW appliquées à l'équation de la chaleur	10
2.3 Un mot sur les simulations informatiques	11
2.4 Liens entre DTQW et CTQW	11
3 Les marches aléatoires quantiques aujourd'hui	15
3.1 État de l'art	15
3.2 Principe de l'expérience	16
3.3 Améliorations possibles du dispositif	18
3.4 Limites expérimentales	19
4 Étude de l'algorithme de Grover	20
4.1 L'algorithme de Grover (DTQW)	20
4.2 Initialisation de la marche	22
4.3 Mise au point d'un algorithme de recherche	24
4.3.1 Dynamique de la marche	24
4.3.2 Détermination de γ_{opt}	26
4.3.3 Détermination de τ_{opt}	29
4.3.4 Limites de l'algorithme	30
4.4 Étude avec initialisation gaussienne	30
4.4.1 Étude à 1D	31
4.4.2 Étude à 2D et 3D	32
5 Conclusion	36
Bibliographie	37

1 Introduction

La seconde révolution quantique et ses promesses sont aujourd’hui au cœur de nombreux débats scientifiques. La physique quantique rend envisageables, grâce à l’exploitation de phénomènes de superposition, d’interférences et d’intrication, des calculs encore bien trop difficiles pour les ordinateurs classiques. Et si le principal champ de recherche se tourne vers les opérations sur des qubits, une alternative se dégage autour des marches aléatoires quantiques, qui, nous le verrons, possèdent de nombreuses propriétés très intéressantes.

L’étude des marches aléatoires a beaucoup avancé depuis que le concept a été introduit pour la première fois, il y a un peu plus d’un siècle. Il ne s’agissait alors que d’un simple marcheur qui se déplaçait aléatoirement vers la gauche ou vers la droite sur un axe horizontal, indépendamment de ses déplacements précédents. Avec l’avènement des ordinateurs, différents algorithmes ont été développés en s’appuyant sur des marches aléatoires, en général sur des graphes. L’apparition de dispositifs physiques capables de faire des marches aléatoires quantiques nous invite à nous demander s’il est possible de gagner en rapidité de calcul en les utilisant.

En effet, lors d’une marche quantique, le marcheur n’a pas seulement la possibilité de se déplacer vers la gauche ou vers la droite, mais grâce au principe de superposition, il peut se déplacer à la fois à gauche et à droite, ce qui permettrait à une marche quantique d’explorer plus rapidement l’espace des configurations. De plus, le marcheur peut interférer avec lui-même, ce qui permet d’introduire un phénomène de mémoire, qui l’empêcherait de revenir sur ses pas.

Ainsi, la réalisation de marches quantiques serait un axe de recherche à exploiter dans le cadre de la révolution quantique. À ce jour, il existe déjà des marches quantiques qui ont été réalisées expérimentalement. Il conviendra d’étudier les deux types de marches quantiques, les marches discrètes (DTQW: discrete-time quantum walk), où l’on applique une série de transformations à une particule, et les marches continues (CTQW: continuous-time quantum walk) où on laisse évoluer une particule sous l’effet d’un hamiltonien.

Le but de ce PSC est donc de comprendre les marches aléatoires quantiques, d’en cerner les propriétés principales et enfin de chercher des algorithmes qui pourraient gagner à être implémentés à partir de marches quantiques.

1.1 Motivation du sujet

Il se trouve que l’Institut d’Optique a mis au point un dispositif permettant de mesurer les trois composantes de l’impulsion d’une particule (TÉNART 2021). Cette connaissance exceptionnelle de la position d’une particule dans l’espace des impulsions, un espace à trois dimensions, ouvre de nombreuses perspectives. L’une d’entre elles est la réalisation d’une marche quantique continue à trois dimensions.

En effet, il est possible de réaliser une marche aléatoire quantique dans l’espace des impulsions en agissant sur l’impulsion d’une particule à l’aide de lasers. Le dispositif de l’Institut d’Optique offre donc la possibilité de mesurer individuellement les trois composantes de l’impulsion d’une particule à la fin de la marche. En utilisant un condensat de Bose-Einstein, constitué en l’occurrence d’environ 10^6 atomes d’hélium, le dispositif permet de connaître très précisément la distribution de probabilité sur les impulsions de la particule à l’issue de la marche (jusqu’à des probabilités de 10^{-5} , ce qui n’est pas permis par les expériences qui utilisent des systèmes de détection non individuels).

Ce PSC a donc pour objectif de trouver des algorithmes intéressants que le dispositif de l’Institut d’Optique pourrait implémenter. Il conviendra donc tout d’abord de comprendre le fonctionnement du dispositif afin d’en dégager les propriétés, qui définiront certaines contraintes sur la marche qu’il faudra prendre en compte. En parallèle, il s’agira d’étudier les marches aléatoires quantiques et leurs applications algorithmiques. L’espérance est de trouver un algorithme intéressant qui respecte les contraintes du dispositif, et à défaut de s’inspirer de certains d’entre eux pour imaginer notre propre algorithme. Cet algorithme devra proposer un avantage en termes de complexité par rapport aux algorithmes classiques, et devra profiter pleinement du dispositif de l’Institut d’Optique, à savoir utiliser les trois dimensions qui nous sont offertes.

1.2 Résumé

Dans la suite sera développé un algorithme de recherche d'un élément dans une liste, une recherche qui se fait dans le cas classique en $O(N)$. Il existe toutefois différents algorithmes quantiques, par exemple l'algorithme de Grover, qui permettent de trouver un élément marqué en $O(\sqrt{N})$ opérations. Nous proposons dans la suite une approche applicable à l'expérience envisagée qui tire parti des trois dimensions pour accélérer ce processus, en cherchant un sommet marqué dans un réseau cubique de positions, parcouru par une marche aléatoire quantique continue. Nous commencerons toutefois par introduire le formalisme associé aux marches aléatoires, quantiques comme classiques, avant de nous intéresser à leur réalisation en laboratoire.

2 Présentation du formalisme

Avant de commencer notre étude, il est important d'introduire un certain formalisme pour traiter des marches aléatoires classiques et quantiques. Dans la suite, on considère des graphes non-orientés.

2.1 Différents types de marches

2.1.1 Marche aléatoire classique discrète (DTRW)

On considère une marche aléatoire sur un ensemble fini de N sites. Une marche aléatoire consiste en un marcheur qui se déplace de manière aléatoire de site en site en fonction des arêtes entre ces derniers. Ce qui nous intéresse toutefois, c'est la distribution de probabilité sur l'ensemble des sites après un certain nombre d'étapes.

On représente la distribution de probabilités sur ces N sites par un vecteur $P(n)$ tel que $P(n)_i = \mathbb{P}(X_n = i)$, avec X_n la variable aléatoire qui représente la position de la particule (du marcheur) après n étapes. Puisqu'il s'agit d'une distribution de probabilités, ce vecteur vérifie :

$$\begin{aligned} \forall i \in [1, N], \quad & P(n)_i \geq 0 \\ \forall n \in \mathbb{N}, \quad & \sum_{i=1}^N P(n)_i = 1 \\ \text{i.e. } \forall n \in \mathbb{N}, \quad & \|P(n)\|_1 = 1 \end{aligned}$$

On introduit aussi l'opérateur U tel que :

$$UP(n) = P(n+1)$$

Il s'agit de l'opérateur qui fait avancer la marche. Celui-ci peut dépendre de n , mais ce sera rarement le cas dans la présente étude. Puisque le vecteur $P(n+1)$ doit rester normé, il vient que U doit être unitaire pour $\|\cdot\|_1$. Par ailleurs, tous ses coefficients doivent être positifs.

Pour modéliser une marche aléatoire sur un graphe, il suffit de prendre pour U la matrice d'adjacence du graphe, en ajustant le poids des arêtes de telle sorte à obtenir un opérateur unitaire. Si U est indépendant de n , on obtient la distribution suivante, avec $U(n) = U^n$ l'opérateur d'évolution de la marche. :

$$P(n) = U(n)P(0) = U^n P(0)$$

2.1.2 Marche aléatoire classique continue (CTRW)

On peut adapter les marches aléatoires discrètes (indexées par $n \in \mathbb{N}$) en marches aléatoires continues (indexées par $t \in \mathbb{R}$). De même que précédemment, on définit le vecteur $P(t)$ tel que $P(t)_i = \mathbb{P}(X(t) = i)$ avec $X(t)$ la variable

aléatoire qui représente la position de la particule au temps t . Ce vecteur doit toujours vérifier la condition de normalisation :

$$\forall t \in \mathbb{R}, \|P(t)\|_1 = 1$$

On introduit cette fois le laplacien L qui définit la dynamique de la marche. Celle-ci est alors régie par l'équation différentielle :

$$\frac{\partial}{\partial t} P = LP$$

Une fois de plus, le laplacien doit garantir que la condition de normalisation est conservée. Ceci implique que la somme des coefficients sur chaque ligne et chaque colonne est nulle. On définit donc le laplacien d'un graphe à partir de sa matrice d'adjacence A :

$$L = A - \text{diag}(\deg(i)) : 1 \leq i \leq N$$

avec $\deg(i)$ le degré d'un sommet i ¹.

Si le graphe est indépendant du temps, la solution de l'équation différentielle est de la forme :

$$P(t) = e^{tL} P(0)$$

avec $U(t) = e^{Lt}$ l'opérateur d'évolution continue.

2.1.3 Marche aléatoire quantique discrète (DTQW)

Le passage des marches classiques aux marches quantiques s'effectue par un changement de métrique. On représente cette fois le marcheur à l'étape n par une fonction d'onde $|\psi_n\rangle$. La probabilité que la particule se trouve à une position $|i\rangle$ est donnée par $\|\langle i|\psi_n\rangle\|^2$. La condition de normalisation est alors la suivante :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \|\psi_n\|_2 = 1$$

On introduit alors aussi un opérateur d'évolution \hat{U} tel que :

$$\hat{U} |\psi_n\rangle = |\psi_{n+1}\rangle$$

Pour garantir la condition de normalisation, il doit être unitaire, au sens de la norme quadratique $\|\cdot\|_2$.

Ces marches quantiques discrètes, *Discrete Time Quantum Walk* ou DTQW en anglais, sont en général mues par un opérateur d'évolution décomposé en un produit de deux opérateurs, un *Coin*, qui introduit le choix aléatoire de la direction, et un opérateur de translation méthode du *coin-toss*. Les interférences entre les différents chemins empruntés par le marcheur, introduites par la mécanique quantique, constructives comme destructives, donnent à ces marches des propriétés très intéressantes que nous développerons dans la suite.

2.1.4 Marche aléatoire quantique continue (CTQW)

De la même manière que dans le cas classique, on peut introduire des marches aléatoires quantiques continues, *Continuous-time quantum walk* ou CTQW en anglais. On laisse évoluer la particule sous l'action d'un hamiltonien, via l'équation de Schrödinger. En réarrangeant les termes, on obtient une formulation très similaire aux marches aléatoires continues classiques :

$$\frac{\partial}{\partial it} \psi = -\frac{\hat{H}}{\hbar} \psi$$

¹Cette définition du laplacien est l'opposée de la définition usuelle en mathématiques. Toutefois, en physique, la définition que nous utilisons correspond mieux aux modèles que nous décrivons.

Du fait de la métrique de la mécanique quantique, la condition sur \hat{H} pour assurer la condition de normalisation est simplement que H doit être hermitien.

Si \hat{H} est indépendant du temps, on connaît la solution à cette équation différentielle :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i t}{\hbar} \hat{H}} |\psi(0)\rangle$$

avec $\hat{U} = e^{-\frac{i t}{\hbar} \hat{H}}$ l'opérateur d'évolution de la marche.

Lors du passage de la marche classique discrète à la marche classique continue, on avait dû transformer la matrice d'adjacence en son laplacien pour garantir la condition de normalisation. Cependant, cette condition s'exprime ici par le caractère hermitien de l'hamiltonien, il n'y a donc pas besoin d'introduire des termes diagonaux non nuls. Toutefois, parce que la métrique a changé, on définit l'hamiltonien tel que $A_{i,j} = |H_{i,j}|^2$. On remarque que cette contrainte laisse une certaine liberté sur la phase des coefficients de l'hamiltonien, liberté qui permet d'associer plusieurs hamiltoniens à un même graphe (FRIGERIO et al. 2021).

En conclusion, on constate deux choses grâce au formalisme introduit. Tout d'abord, les marches discrètes et continues semblent, dans leur définition, assez semblables (notamment au travers de l'opérateur d'évolution). On développera dans la suite les liens entre marches continues et discrètes. Ensuite, le formalisme entre marches classiques et quantiques ne semble différer que par la métrique employée, mais nous verrons que cela a de grandes conséquences sur la dynamique des marches, et c'est précisément de cette différence que nous souhaitons tirer parti dans la suite de ce PSC.

2.2 Exemples et comparaisons

2.2.1 DTRW et DTQW

Intéressons-nous tout d'abord à la marche aléatoire la plus simple qui soit. On considère une marche discrète sur un axe horizontal indexé par \mathbb{Z} . On attribue au marcheur, à savoir une particule, une position initiale $x = 0$.

On introduit la dynamique suivante : à chaque étape, la particule se déplace aléatoirement (avec une probabilité $p=\frac{1}{2}$) vers la gauche ou la droite. Cette marche est bien connue dans le cas classique, et on obtient la distribution suivante :

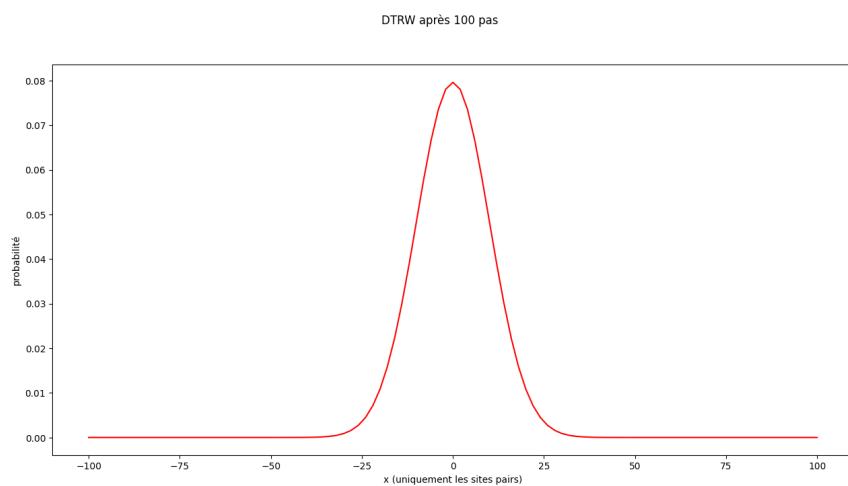


Fig. 1: Distribution d'une marche aléatoire classique à temps discret après 100 pas

On choisit de ne représenter que les sites pairs, car après un nombre pair d'étapes, le site où se trouve le marcheur doit forcément être à une distance paire de son point de départ, $x=0$.

On souhaite maintenant implémenter la même dynamique pour une marche quantique. Pour pouvoir effectuer le choix de la gauche ou de la droite, on introduit un état de spin (le *coin-state*), qui selon qu'il s'agit de $|\uparrow\rangle$ ou de $|\downarrow\rangle$ permet à la particule de se déplacer respectivement vers la droite ou vers la gauche. L'état de la particule sera donc défini par sa position et son spin : $|\psi\rangle = |x, \downarrow\rangle$. L'opérateur *shift* \hat{T} qui permet le déplacement de la particule est le suivant :

$$\hat{T} = \sum_{x=-\infty}^{\infty} |x-1, \downarrow\rangle \langle x, \downarrow| + |x+1, \uparrow\rangle \langle x, \uparrow|$$

Par exemple,

$$\hat{T} |0, \uparrow\rangle = |1, \uparrow\rangle$$

$$\hat{T} |0, \downarrow\rangle = |-1, \downarrow\rangle$$

Pour réaliser la marche, on choisit donc de partir d'une particule :

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \downarrow\rangle + |0, \uparrow\rangle)$$

On obtient après l'application d'un *shift* :

$$\hat{T} |\psi_0\rangle = |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1, \downarrow\rangle + |1, \uparrow\rangle)$$

On retrouve bien le comportement des marches classiques, avec après une étape $\mathbb{P}(x=1) = \frac{1}{2}$ et $\mathbb{P}(x=-1) = \frac{1}{2}$. Toutefois, on remarque que si on applique une nouvelle fois l'opérateur \hat{T} , la partie de spin positif va avancer de nouveau, et la partie de spin négatif va reculer de nouveau. On a perdu le caractère aléatoire de la marche, puisque les spins négatifs sont à gauche et les spins positifs à droite. C'est pourquoi on introduit un mélange des spins par l'opérateur *coin* \hat{C} . Dans le cas présent, on choisit l'opérateur de Hadamard :

$$\begin{aligned}\hat{C} |\uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \\ \hat{C} |\downarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)\end{aligned}$$

soit dans l'espace des spins :

$$\hat{C} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Ce *coin* sera donc appliqué à chaque étape avant le *shift*. On obtient ainsi l'opérateur d'évolution :

$$\hat{U} = \hat{T} \hat{C}$$

et la marche suit la dynamique suivante :

$$|\psi_n\rangle = \hat{U}^n |\psi_0\rangle$$

De cette manière, on obtient la marche souhaitée. En initialisant la marche par $|\psi_0\rangle = |0, \uparrow\rangle$ on obtient la distribution ci-dessous.

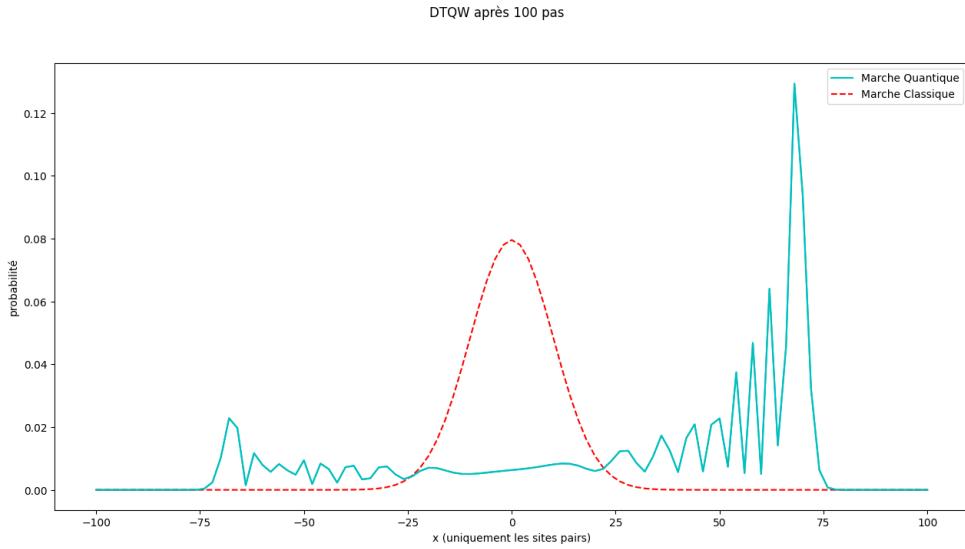


Fig. 2: Distribution de la marche quantique à temps discret après 100 pas pour $|\psi_0\rangle = |0, \uparrow\rangle$

On remarque que cette marche s'étale plus rapidement que la marche classique, et que la probabilité de rester proche de l'origine de la marche est extrêmement faible par rapport à une distribution gaussienne. Essayons de comprendre d'où vient ce phénomène à l'aide des calculs suivants.

$$\begin{aligned}
 |\psi_0\rangle &= |0, \uparrow\rangle \\
 \hat{C}|\psi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, \uparrow\rangle + |0, \downarrow\rangle) \\
 |\psi_1\rangle &= \hat{T}(\hat{C}|\psi_0\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, \uparrow\rangle + |-1, \downarrow\rangle) \\
 \hat{C}|\psi_1\rangle &= \frac{1}{2}(|1, \uparrow\rangle + |1, \downarrow\rangle + |-1, \uparrow\rangle - |-1, \downarrow\rangle) \\
 |\psi_2\rangle &= \hat{T}(\hat{C}|\psi_1\rangle) = \frac{1}{2}(|2, \uparrow\rangle + |0, \downarrow\rangle + |0, \uparrow\rangle - |-2, \downarrow\rangle) \\
 \hat{C}|\psi_2\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}}((|2, \uparrow\rangle + |2, \downarrow\rangle) + (|0, \uparrow\rangle - |0, \downarrow\rangle) + (|0, \uparrow\rangle + |0, \downarrow\rangle) + (|-2, \downarrow\rangle - |-2, \uparrow\rangle)) \\
 |\psi_3\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(|3, \uparrow\rangle + |1, \downarrow\rangle + 2|1, \uparrow\rangle - |-1, \uparrow\rangle + |-3, \downarrow\rangle)
 \end{aligned}$$

On observe en rouge les termes qui disparaissent à cause des interférences. On constate déjà pour $n = 3$ qu'à cause de cela, la marche est biaisée vers la droite (avec une probabilité $p = 0.75$ de se retrouver à droite de l'origine). C'est ce phénomène qui cause d'une part la plus importante dispersion de la marche, et d'autre part son biais vers la droite.

Le fait que la marche soit biaisée peut être gênant. On voudrait trouver un moyen d'équilibrer la marche. Un moyen simple de le faire serait d'ajouter au résultat final son symétrique, qui est facile à obtenir en choisissant comme état initial $\psi_0 = |0, \downarrow\rangle$. Toutefois, il faut éviter que les deux marches interfèrent entre elles. Pour cela, on

additionne nos deux marches orthogonalement :

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}(|0, \uparrow\rangle + i|0, \downarrow\rangle)$$

On obtient alors effectivement une marche symétrique.

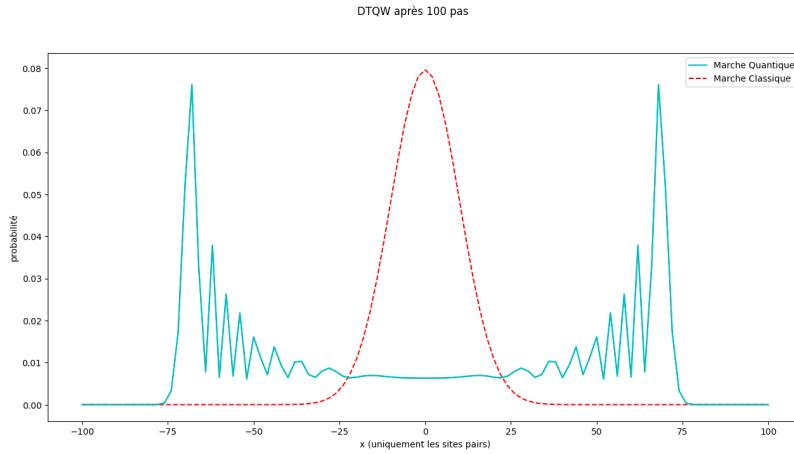


Fig. 3: Distribution de la marche quantique à temps discret après 100 pas pour $|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}(|0, \uparrow\rangle + i|0, \downarrow\rangle)$

Ainsi, le mélange des spins introduit un phénomène d'interférences, qui diminue la propension du marcheur à faire demi-tour. La marche quantique conserve en quelque sorte en mémoire ses déplacements précédents, et s'étale donc plus rapidement que la marche classique.

C'est pourquoi l'écart-type de la marche aléatoire quantique est linéaire en le nombre de pas de la marche, alors que dans le cas de la marche classique l'écart-type est en $O(\sqrt{N})$ (cf. 4). Cet étalement est particulièrement intéressant lorsqu'on souhaite explorer un espace, car la marche aléatoire présente une accélération quadratique de l'exploration par rapport à la marche classique.

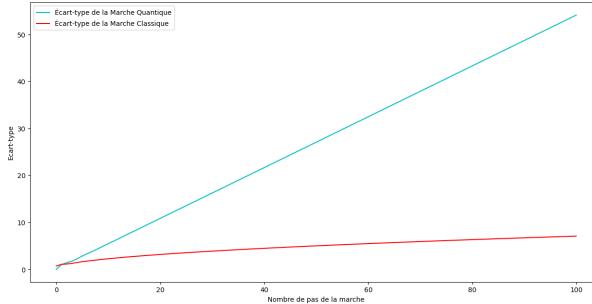


Fig. 4: Comparaison de l'écart-type de la distribution d'une marche classique vs. quantique

On retrouvera cette accélération quadratique par la suite dans l'étude de l'algorithme de Grover. Celui-ci permet de trouver un élément dans une liste, opération qui se fait sur un ordinateur en $O(N)$. L'accélération quadratique permise par la physique quantique permet toutefois à l'algorithme de Grover de s'exécuter en $O(\sqrt{N})$.

2.2.2 CTRW et CTQW appliquées à l'équation de la chaleur

Pour mieux comprendre les marches continues, on va s'intéresser à l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

avec α la diffusivité thermique.

Pour résoudre ce problème, on choisit de discréteriser l'espace des positions. On reformule l'équation différentielle en utilisant l'expression de la dérivée seconde discrète et on obtient :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{T(x+1) - 2T(x) + T(x-1)}{1^2}$$

Ou encore écrit de façon matricielle :

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= LT \\ L_{i,j} &= \alpha(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1} - 2\delta_{i,j}) \end{aligned}$$

On remarque qu'on retrouve ici le formalisme des CTRW introduit précédemment. L serait ici le laplacien d'un graphe dont les sommets seraient les positions du réseau, avec une arête munie d'un poids 1 entre deux positions voisines. La matrice d'adjacence de ce graphe (pour un graphe à 6 sommets) est la suivante :

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Les similarités entre les équations des CTRW et des CTQW peuvent laisser penser qu'il est possible de simuler des processus de diffusion à partir de marches quantiques. On observe donc le comportement d'une CTQW avec un hamiltonien correspondant (égal) à la matrice d'adjacence de l'équation de la chaleur. L'hamiltonien qu'on obtient, avec un couplage identique et indépendant du temps entre toute paire de voisins du réseau, sera d'ailleurs beaucoup utilisé dans la suite, car il s'agit de la forme la plus naturelle de marche aléatoire continue. En deux dimensions, on obtient pour les deux marches :

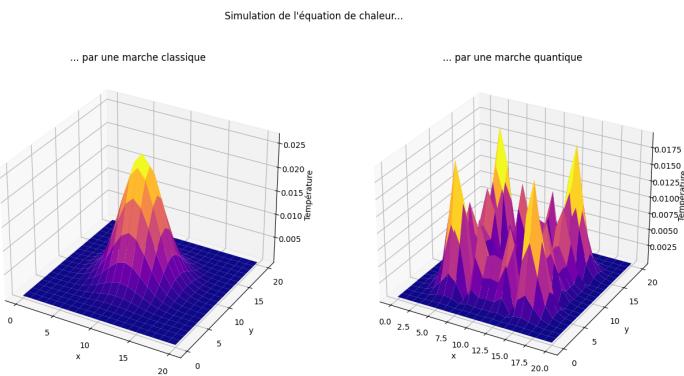


Fig. 5: Comparaison d'un phénomène de diffusion classique vs. quantique

On se rend compte que les interférences sont très gênantes lorsqu'il s'agit de simuler un processus classique. La dynamique de la marche est totalement différente, comme en témoignent les simulations.

On pouvait aussi espérer trouver des applications des marches aléatoires continues dans la résolution d'équations de Fokker-Planck (WANG 2013), qui permettent l'étude de processus stochastiques, comme le mouvement brownien, par une approche similaire à celle présentée pour l'équation de la chaleur. Toutefois, les phénomènes d'interférences introduits par la mécanique quantique ne permettent pas d'obtenir des résultats satisfaisants.

Néanmoins, on observe une fois de plus que la dispersion des marches quantiques est bien plus importante que pour les marches classiques, ce qui va nous amener à étudier des algorithmes de recherche, en espérant obtenir d'aussi bons résultats que l'algorithme de Grover.

2.3 Un mot sur les simulations informatiques

La stratégie choisie pour simuler les différentes marches présentées dans ce PSC se base sur le formalisme introduit plus haut. S'il existe en PYTHON des librairies, comme par exemple *QuTiP*, qui permettent de simuler des processus quantiques, nous avons choisi de nous en passer. Tout d'abord parce que nous souhaitions aussi simuler des marches classiques. Ensuite parce que nous utilisons principalement des hamiltoniens et lapaciens indépendants du temps, nous connaissons les solutions explicites des marches. Nous avons par conséquent uniquement besoin d'outils permettant de faire de l'algèbre linéaire, ce que fournit la librairie *NumPy*.

Les méthodes qui permettent de simuler les quatre types de marches sont pratiquement identiques, du fait des fortes ressemblances au niveau du formalisme introduit. Les marches continues sont simulées à partir d'un pas de temps dt pour lequel on calcule l'opérateur d'évolution $U = e^{Ldt}$. La méthode renvoie alors la marche discrète qui correspond aux puissances de l'opérateur U .

Le passage des marches classiques aux marches quantiques se fait aussi très simplement, il suffit de passer de $\|\cdot\|_1$ à $\|\cdot\|_2$ et de transformer dt en $i \cdot dt$.

Dans les simulations, le temps est donné en fonction d'une unité u définie de la manière suivante :

$$u = \frac{2\pi}{\Omega_{max}}$$

avec $\hbar\Omega_{max}$ correspondant au coefficient maximal de l'hamiltonien de la marche. Autrement dit, u correspond au temps caractéristique de la transition la plus rapide de l'hamiltonien.

Le code, accompagné d'exemples de simulations, est disponible ici.

2.4 Liens entre DTQW et CTQW

Les forts liens dans le formalisme entre marches continues et discrètes nous incitent à nous demander quels sont les liens entre DTQW et CTQW. Plus précisément, puisque le dispositif expérimental auquel nous nous intéressons permet la simulation de CTQW, il est naturel de se demander comment passer d'une marche continue à une marche discrète.

Commençons par étudier le cas à une dimension, avec une marche sur une ligne constituée des sites $|n\rangle$ pour $m \in \mathbb{Z}$, et où l'état interne est représenté par $|+\rangle$ ou $|-\rangle$.

Les équations de la marche discrète sont alors, en prenant un opérateur *coin* unitaire $\hat{C} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$:

$$\begin{aligned}\psi_+(n, \tau + 1) &= a^* \psi_+(n - 1, \tau) + c^* \psi_-(n - 1, \tau) \\ \psi_-(n, \tau + 1) &= d^* \psi_-(n + 1, \tau) + b^* \psi_+(n + 1, \tau)\end{aligned}$$

où $\psi_+(n, \tau)$ (resp. $\psi_-(n, \tau)$) désigne l'amplitude de probabilité de l'état $|+, n\rangle$ (resp. $|-, n\rangle$) à l'instant discret τ . Comment obtenir une équation similaire à partir d'une marche continue sur un ensemble d'états $|i\rangle$ pour $i \in \mathbb{Z}$? L'astuce consiste à encoder l'état interne (+ ou -) dans la parité du site (PATEL, RAGHUNATHAN et RUNGTA 2005 ; STRAUCH 2006). Ainsi, le site $|+, m\rangle$ (de la marche discrète) correspond au site $|2m\rangle$ (de la marche continue), tandis que le site $|-, m\rangle$ (discret) correspond lui au site $|2m + 1\rangle$ (continu).

Soit \hat{H} l'hamiltonien qui décrit la marche continue. Dans le cas de la marche sur la ligne, on considère un couplage identique en amplitude entre les différents sites (que l'on suppose avoir la même énergie nulle) avec une phase alternant entre deux valeurs, θ_e et θ_o , en fonction de la parité du site de "départ". L'hamiltonien s'écrit donc :

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & \gamma e^{i\theta_o} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \gamma e^{-i\theta_o} & 0 & \gamma e^{i\theta_e} & 0 & \dots \\ \dots & 0 & \gamma e^{-i\theta_e} & 0 & \gamma e^{i\theta_o} & \dots \\ \dots & 0 & 0 & \gamma e^{-i\theta_o} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

Cet hamiltonien peut être décomposé comme la somme de deux hamiltoniens diagonaux par blocs couplant à chaque fois uniquement deux sites entre eux de telle sorte que $\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}_e$ avec :

$$\hat{H}_e = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & \gamma e^{i\theta_e} & 0 & \dots \\ \dots & 0 & \gamma e^{-i\theta_e} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$\hat{H}_o = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & \gamma e^{i\theta_o} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \gamma e^{-i\theta_o} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & \gamma e^{i\theta_o} & \dots \\ \dots & 0 & 0 & \gamma e^{-i\theta_o} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

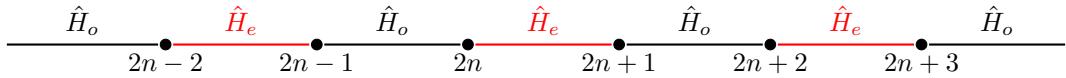


Fig. 6: Schéma de la discréétisation à 1D

Pour chacun de ces hamiltoniens, on peut se restreindre à un sous-espace de dimension 2 stable pour calculer l'opérateur d'évolution associé (les hamiltoniens étant diagonaux par blocs 2x2, les opérateurs d'évolution associés le seront aussi). On considère les deux opérateurs d'évolution \hat{U}_e et \hat{U}_o avec $\hat{U}_j = e^{-i\frac{\hat{H}_j}{\hbar}T_j}$ pour un certain T_j dont le choix déterminera les paramètres quantifiant la marche discrète dans les équations que l'on cherche à obtenir.

On peut alors calculer :

$$\hat{U}_e = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \cos\left(\frac{\gamma T_e}{\hbar}\right) & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & \cos\left(\frac{\gamma T_e}{\hbar}\right) & -ie^{i\theta_e} \sin\left(\frac{\gamma T_e}{\hbar}\right) & 0 & \dots \\ \dots & 0 & -ie^{-i\theta_e} \sin\left(\frac{\gamma T_e}{\hbar}\right) & \cos\left(\frac{\gamma T_e}{\hbar}\right) & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & \cos\left(\frac{\gamma T_e}{\hbar}\right) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$\hat{U}_o = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \cos\left(\frac{\gamma T_o}{\hbar}\right) & -ie^{i\theta_o} \sin\left(\frac{\gamma T_o}{\hbar}\right) & 0 & 0 & \dots \\ \dots & -ie^{-i\theta_o} \sin\left(\frac{\gamma T_o}{\hbar}\right) & \cos\left(\frac{\gamma T_o}{\hbar}\right) & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & \cos\left(\frac{\gamma T_o}{\hbar}\right) & -ie^{i\theta_o} \sin\left(\frac{\gamma T_o}{\hbar}\right) & \dots \\ \dots & 0 & 0 & -ie^{-i\theta_o} \sin\left(\frac{\gamma T_o}{\hbar}\right) & \cos\left(\frac{\gamma T_o}{\hbar}\right) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

On choisit les paramètres $\theta_o = \beta, \theta_e = \pi + \alpha, T_o = \frac{\hbar\pi}{\gamma^2}, T_e = \frac{\hbar}{\gamma}(\frac{\pi}{2} - \theta)$. On a alors :

$$\hat{U}_e = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \sin\theta & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & \sin\theta & ie^{i\alpha} \cos\theta & 0 & \dots \\ \dots & 0 & ie^{-i\alpha} \cos\theta & \sin\theta & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & \sin\theta & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$\hat{U}_o = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & -ie^{i\beta} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & -ie^{-i\beta} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & -ie^{i\beta} & \dots \\ \dots & 0 & 0 & -ie^{-i\beta} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$\hat{U}_o \hat{U}_e |2n+1\rangle = -ie^{-i\beta} \sin\theta |2n+2\rangle + e^{i(\alpha+\beta)} \cos\theta |2n-1\rangle$$

$$\hat{U}_o \hat{U}_e |2n\rangle = e^{-i(\alpha+\beta)} \cos\theta |2n+2\rangle - ie^{i\beta} \sin\theta |2n-1\rangle$$

On considère la marche à temps discret définie par : $|\Psi(\tau)\rangle = [U_o U_e]^\tau |\Psi(0)\rangle$ avec $|\Psi(\tau)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \psi(n, \tau) |n\rangle$ et τ entier. On définit alors $\psi_+(n, \tau) = \psi(2n, \tau)$ et $\psi_-(n, \tau) = \psi(2n+1, \tau)$. On obtient alors :

$$\psi_+(n, \tau+1) = e^{i(\alpha+\beta)} \cos(\theta) \psi_+(n-1, \tau) + ie^{i\beta} \sin(\theta) \psi_-(n-1, \tau)$$

$$\psi_-(n, \tau+1) = e^{-i(\alpha+\beta)} \cos(\theta) \psi_-(n+1, \tau) + ie^{-i\beta} \sin(\theta) \psi_+(n+1, \tau)$$

En prenant $\alpha = -\frac{\pi}{2}, \beta = 0$, on obtient une marche aléatoire discrète de Hadamard :

$$\psi_+(n, \tau+1) = \frac{i}{\sqrt{2}} \psi_+(n-1, \tau) + \frac{i}{\sqrt{2}} \psi_-(n-1, \tau)$$

$$\psi_-(n, \tau+1) = -\frac{i}{\sqrt{2}} \psi_-(n+1, \tau) + \frac{i}{\sqrt{2}} \psi_+(n+1, \tau)$$

Ainsi, par l'application d'hamiltoniens sur des durées bien choisies, il est possible d'obtenir une marche aléatoire discrète avec un contrôle important des paramètres de celle-ci.

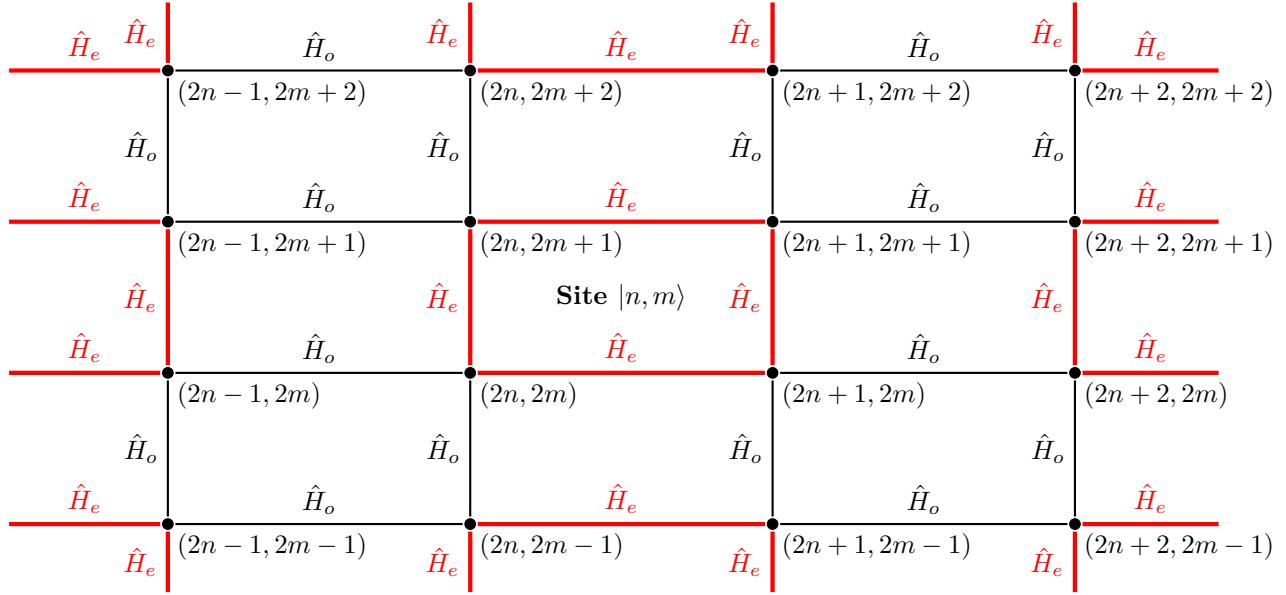


Fig. 7: Schéma de la discréétisation à 2D

Comment étendre cette méthode aux dimensions supérieures ? À une dimension, on regroupait deux sites (correspondant aux deux directions possibles) pour n'en former qu'un seul avec deux états internes déterminant la direction de la prochaine étape de la marche. De même, à deux dimensions, on peut regrouper 4 sites en un seul, chacun des "sous-sites" correspondant à différentes directions possibles pour le déplacement suivant (entre "haut", "bas", "gauche" et "droite"). Le site $|n, m\rangle$ utilisé pour la marche discrète est donc composé des quatre sous-sites $|2n, 2m\rangle, |2n+1, 2m\rangle, |2n, 2m+1\rangle, |2n+1, 2m+1\rangle$. On décompose de même l'hamiltonien en deux hamiltoniens, cette fois en faisant en sorte que chacun d'eux agisse sur des carrés deux à deux disjoints. Le premier hamiltonien aura comme effet de "mélanger" l'état interne grâce à des transitions entre les différents sous-sites d'un même site. Le second permettra des transitions entre les sites.

On pourrait de même étendre la procédure à 3D, cette fois, 6 directions étant accessibles. Il faudrait alors utiliser des sites regroupant 8 sous-sites.

Il est aussi possible de passer d'une DTQW à une CTQW en faisant tendre vers 0 le pas de la marche discrète (STRAUCH 2006) (même si cet aspect présente moins d'intérêt dans le cas que nous étudions).

3 Les marches aléatoires quantiques aujourd’hui

3.1 État de l’art

Afin d’évaluer l’intérêt du dispositif que l’on se propose d’étudier, il est important de le comparer à d’autres méthodes de simulation. Les critères importants sont le nombre de pas que chaque méthode permet de simuler, la variété des graphes qu’il est possible de simuler (le nombre de sites, le nombre d’arêtes, le contrôle sur les amplitudes et les phases de ces dernières) et enfin la qualité de la dispersion des marches simulées. On peut retrouver dans la littérature deux types de méthodes : celles qui utilisent la manipulation d’atomes, et celles qui utilisent des photons.

Si l’expérience de l’Institut d’Optique est la première à être capable de simuler des marches aléatoires quantiques à trois dimensions avec un grand nombre de pas, ce n’est pas la première à utiliser des condensats d’atomes froids pour implémenter une marche. Une autre expérience (PREISS et al. 2015) a utilisé un condensat d’atomes de rubidium ^{87}Rb . Le dispositif expérimental consiste en un réseau optique, créé à l’aide de lasers, constitué de différents sites (qui correspondent à des creux du potentiel créé par les lasers) couplés par effet tunnel. Une interaction réglable entre les particules est ajoutée pour observer différents comportements. Ce dispositif a permis de réaliser une marche aléatoire d’une dizaine de pas environ sur laquelle on observe clairement le phénomène de transport balistique². Malgré la possibilité d’observer divers comportements quantiques très différents (comme la fermionisation des particules en présence d’une forte interaction répulsive), cette marche reste fortement limitée par le fait qu’elle ne se fasse qu’à une seule dimension. Le fait d’utiliser deux photons intriqués sur un espace à 1D permet d’augmenter virtuellement la dimension de la marche, et donc d’observer une marche à deux dimensions. Enfin, la question de la rapidité de l’expérience se pose, car les atomes doivent être placés au début sur une même ligne pour que chacun puisse ensuite effectuer sa marche à 1D, ce qui demande un temps de préparation important.

Une autre implémentation basée sur des atomes (en l’occurrence de Césium) a été utilisée par M. Karski et al. dans l’article KARSKI et al. 2009, en utilisant la méthode du *coin-toss* (présentée dans son formalisme théorique plus tôt). La direction du spin des atomes est utilisée pour déterminer dans quelle direction l’atome se déplacera. La manipulation de l’état interne de l’atome se fait en utilisant le couplage de champs électromagnétiques avec l’état interne de l’atome. Les résultats obtenus avec cette expérience font état d’un maximum de 24 étapes réalisées. Cependant, même si un transport balistique est obtenu jusqu’à $N = 12$ étapes, celui-ci est perturbé au-delà par des phénomènes de décohérence. De plus, la marche n’a lieu qu’à une dimension, et avec une seule particule étudiée, ce qui limite considérablement l’intérêt réel de cette marche.

Enfin, une dernière implémentation plus récente a utilisé des atomes de ^{88}Sr , dans un réseau optique créé à l’aide de pinces optiques, pour réaliser une marche aléatoire continue avec un hamiltonien de la forme $\hat{H} = -J \sum_{i,j} A_{i,j} |i\rangle\langle j| - \sum_i V_i |i\rangle\langle i|$ (YOUNG et al. 2022). Le réseau utilisé est composé de 200 sites et le nombre d’étapes est de l’ordre de la dizaine. Un tel réseau a été utilisé pour réaliser un algorithme de recherche spatiale sur un graphe constitué de 45 sites.

Les méthodes utilisant des atomes sont loin d’être les seules à avoir été étudiées pour la simulation de marches aléatoires quantiques. De nombreux dispositifs ont choisi la manipulation de photons à l’aide de dispositifs optiques et il convient aussi d’étudier les performances de ces derniers.

Un premier exemple d’une telle méthode est fourni par ESPOSITO, BARROS et HERNÁNDEZ 2022 et utilise ainsi la lumière émise par un laser se propageant selon une certaine direction privilégiée (que l’on notera z), qui correspond au marcheur. Les différents sites accessibles sont encodés dans les composantes du vecteur d’onde orthogonales à z (le site $|m, n\rangle$ correspond ainsi à un mode de propagation proportionnel à $e^{i(\Delta k_\perp(mx+ny)+k_z z-\omega t)}$) ce qui correspond à un réseau à 2D. La polarisation de l’onde (circulaire gauche ou circulaire droite) est ici utilisée pour encoder le *coin-state*. Les manipulations se font ensuite à l’aide de composants optiques (*g-plates* et *waveplates* à partir de cristaux liquides). Cette expérience a aussi utilisé deux photons intriqués pour simuler (virtuellement) une marche

²déplacement linéaire en temps par opposition au transport diffusif d’une marche classique, lui proportionnel à \sqrt{t}

tridimensionnelle. Cependant, le nombre d'étapes est très fortement limité (seulement 3 étapes réalisées) du fait des pertes optiques importantes au niveau des différents composants optiques. Une autre expérience (SCHREIBER et al. 2012) présente un dispositif similaire (malgré quelques légères variations dans la réalisation expérimentale) et fait état d'un maximum de 7 étapes simulées.

D'autres chercheurs ont exploré la réalisation de marches aléatoires en utilisant des réseaux optiques créés par des techniques d'*écriture* à l'aide de lasers femtoseconde. La première expérience (EHRHARDT et al. 2021) utilise ainsi un réseau de guides d'ondes à 2D, auquel vient s'ajouter une dimension supplémentaire contenue dans la polarisation des photons. La marche se fait en utilisant deux photons dans un état intriqué. L'article témoigne ainsi de l'observation de phénomènes d'interférences typiquement quantiques, mais reste limité à seulement quelques étapes.

Une deuxième expérience (JIAO et al. 2021) utilise une technique similaire pour obtenir 37 sites couplés chacun à 6 voisins. La capacité de moduler le couplage d'un site à l'autre de manière individuelle permet de simuler des structures de graphes très complexes. En injectant deux photons dans le dispositif, le graphe obtenu comporte ainsi $37 \times 37 = 1369$ noeuds et 6660 arêtes. Les résultats obtenus mettent en évidence un comportement quantique bien que le nombre d'étapes simulées reste assez faible (une dizaine d'étapes).

En conclusion, si de nombreuses méthodes de simulation de marches aléatoires quantiques sont explorées actuellement, le nombre d'étapes simulées reste assez faible (au plus de l'ordre de la vingtaine d'étapes). De surcroît, les structures à 3D restent rares. Enfin, la capacité de contrôler individuellement le couplage d'un site à son voisin n'est pas garantie par tous les dispositifs. Le dispositif de l'Institut d'Optique n'a quant à lui pas tous ces défauts.

3.2 Principe de l'expérience

Nous allons maintenant nous intéresser au principe de fonctionnement du dispositif de l'Institut d'Optique, basé sur l'article GADWAY 2015.

Cette approche consiste à considérer une particule de masse M , plongée dans un champ électrique \mathbf{E} créé par différentes sources laser. On considère l'atome comme pouvant être assimilé à un système à deux niveaux (approximation valide sous réserve d'un bon choix du désaccord et de la polarisation de la lumière), un fondamental noté $|g\rangle$ d'énergie nulle et un état excité noté $|e\rangle$ d'énergie $\hbar\omega_{eg}$. En considérant un champ électrique incident de longueur d'onde λ grande devant la taille de l'atome, on peut se placer dans le cadre de l'approximation dipolaire pour obtenir l'hamiltonien global décrivant le système, où $\hat{\mathbf{d}} = -e\hat{\mathbf{r}}$ désigne l'opérateur moment dipolaire de l'atome :

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + \hbar\omega_{eg}|e\rangle\langle e| - \hat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}$$

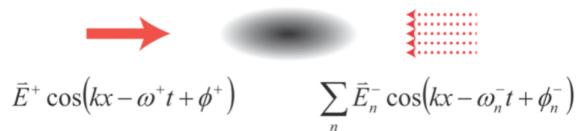


Fig. 8: Disposition des lasers contrôlant l'évolution (depuis GADWAY 2015)

On considère un champ électrique constitué d'une composante \mathbf{E}^+ se propageant selon l'axe $+x$ (en gras sur 8) et de composantes \mathbf{E}_n^- (où $n \in \mathbb{Z}$) se propageant selon l'axe $-x$ (avec des vecteurs d'ondes opposés, mais de même norme k , en pointillé sur 8). En supposant que les fréquences de ces ondes, notées respectivement ω^+ et ω_n^- , sont très différentes de la fréquence de transition entre $|g\rangle$ et $|e\rangle$ (avec un décalage Δ grand devant les autres fréquences

caractéristiques de l'évolution du système), on peut obtenir une situation où tout se passe comme si l'état excité pouvait être ignoré, et où les seules transitions possibles se font entre les états $|n\rangle$, états correspondant à l'atome dans son état fondamental $|g\rangle$ et possédant une impulsion $\mathbf{p}_n = 2n\hbar\mathbf{k}$, via des processus à 2 photons, que l'on peut voir (schématiquement) comme l'absorption d'un photon correspondant au champ \mathbf{E}^+ et la réémission stimulée d'un photon correspondant au champ \mathbf{E}^- .

L'énergie d'un site $|n\rangle$ est donc $E_n = 4n^2 E_r$ avec $E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Le profil quadratique de l'énergie est particulièrement intéressant, car le couplage entre deux sites se base sur leur différence en énergie. Or la différence d'énergie entre deux sites voisins sera $4E_r(2n+1)$, et sera donc différente pour toute paire de sites voisins, ce qui permet un contrôle sur chaque transition individuelle entre deux sites voisins.

En utilisant la démarche présentée dans ASPECT et al. s. d., on peut obtenir l'hamiltonien d'interaction effectif décrivant les couplages entre les différents états $|n\rangle$ dans sa forme générale :

$$\hat{H}_{int} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} t_n (e^{i\phi_n} |n+1\rangle\langle n| + e^{-i\phi_n} |n\rangle\langle n+1|)$$

où t_n et ϕ_n sont des paramètres réels modifiables en réglant l'amplitude et la phase des champs électriques utilisés.

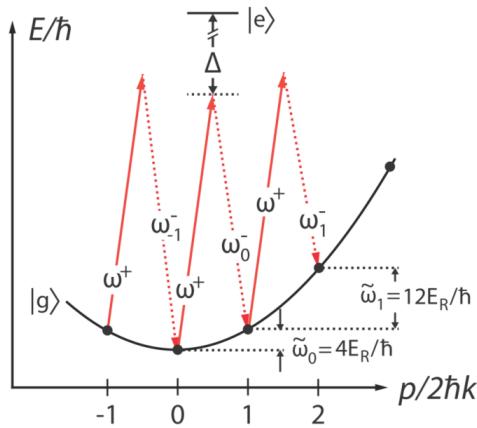


Fig. 9: Structure des niveaux d'énergie de la particule (depuis GADWAY 2015)

Ce dispositif peut être étendu aux dimensions supérieures. En deux dimensions, il suffit de rajouter des lasers dans une direction différente des premiers lasers. Un site est alors décrit par une paire d'entiers $|n, m\rangle$. Il faut toutefois faire attention à ce que le nouveau profil d'énergie reste compatible avec l'expérience. En effet, on ne peut pas choisir une direction orthogonale.

Lorsqu'on considère les transitions $|n_1, m_1\rangle \leftrightarrow |n_1, m_1 + 1\rangle$ et $|n_2, m_2\rangle \leftrightarrow |n_2, m_2 + 1\rangle$, transitions d'énergies respectives $E_1 = 4E_r(n_1^2 + 2m_1 + 1)$ et $E_2 = 4E_r(n_2^2 + 2m_2 + 1)$, on ne peut pas garantir qu'il n'existe pas de configuration pour laquelle $E_1 = E_2$. On ne peut donc pas garantir un contrôle individuel sur chaque transition. C'est pourquoi on choisit d'orienter le deuxième ensemble de laser dans une direction faisant un angle θ avec la première direction.

Le site $|n, m\rangle$ correspond alors à un état d'impulsion $\mathbf{p}_{n,m} = 2\hbar(n\mathbf{k}_1 + m\mathbf{k}_2)$ où $\mathbf{k}_1 = k\mathbf{x}$ et $\mathbf{k}_2 = k(\cos\theta\mathbf{x} + \sin\theta\mathbf{y})$. L'énergie du site $|n, m\rangle$ est donc $E_{m,n} = 4E_R(m^2 + n^2 + 2mn\cos\theta)$. Tant que $\theta \notin \{0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}\}$, on obtient un réseau de sites à 2D avec des résonances uniques entre chacun des sites. La transition entre le site $|n, m\rangle$ et le site $|n + 1, m\rangle$ séparés par un changement d'impulsion $2\hbar\mathbf{k}_1$ a une fréquence caractéristique $\tilde{\omega}_{m,n}^x = (2m + 1 + 2n\cos\theta)4E_R/\hbar$ et la transition entre le site $|n, m\rangle$ et le site $|n, m + 1\rangle$ séparés par un changement d'impulsion $2\hbar\mathbf{k}_2$ a une fréquence caractéristique $\tilde{\omega}_{m,n}^y = (2n + 1 + 2m\cos\theta)4E_R/\hbar$.

On peut alors obtenir l'hamiltonien effectif à 2D :

$$\hat{H}_{eff}^I = \sum_{m,n} [t_{m,n}^x (e^{i\phi_{m,n}^x} |n+1,m\rangle\langle n,m| + e^{-i\phi_{m,n}^x} |n,m\rangle\langle n+1,m|) \\ + t_{m,n}^y (e^{i\phi_{m,n}^y} |n,m+1\rangle\langle n,m| + e^{-i\phi_{m,n}^y} |n,m\rangle\langle n,m+1|)]$$

Enfin, la généralisation à 3D se fait en ajoutant une dernière paire de faisceaux selon un troisième axe non aligné dans le plan formé par les deux précédents, correspondant à un vecteur d'onde

$\mathbf{k}_3 = k[\cos \alpha \mathbf{z} + \sin \alpha (\cos \theta \mathbf{x} + \sin \theta \mathbf{y})]$ où on impose α . Les sites sont cette fois décrits par trois entiers et le site $|n, m, l\rangle$ correspond à des impulsions $\mathbf{p}_{n,m,l} = 2\hbar(n\mathbf{k}_1 + m\mathbf{k}_2 + l\mathbf{k}_3)$ où $\mathbf{k}_1 = k\mathbf{x}$, $\mathbf{k}_2 = k(\cos \theta \mathbf{x} + \sin \theta \mathbf{y})$ et $\mathbf{k}_3 = k(\cos \theta \cos \alpha \mathbf{z} + \sin \theta \cos \alpha \mathbf{y} + \sin \alpha \mathbf{z})$.

Les sites ont des énergies $E_{n,m,l} = 4E_R(m^2 + n^2 + l^2 + 2mn \cos \theta + 2ln \cos \theta \cos \alpha + 2lm \cos \alpha)$. La transition entre le site $|n, m, l\rangle$ et le site $|n+1, m, l\rangle$, séparés par un changement d'impulsion $2\hbar\mathbf{k}_1$, a une fréquence caractéristique $\tilde{\omega}_{m,n,l}^x = (2n+1+2m \cos \theta + 2l \cos \theta \cos \alpha)4E_R/\hbar$; la transition entre le site $|n, m, l\rangle$ et le site $|n, m+1, l\rangle$, séparés par un changement d'impulsion $2\hbar\mathbf{k}_2$, a une fréquence caractéristique $\tilde{\omega}_{m,n,l}^y = (2m+1+2n \cos \theta + 2l \cos \alpha)4E_R/\hbar$ et la transition entre le site $|n, m, l\rangle$ et le site $|n, m, l+1\rangle$, séparés par un changement d'impulsion $2\hbar\mathbf{k}_3$, a une fréquence caractéristique $\tilde{\omega}_{m,n,l}^z = (2l+1+2n \cos \theta \cos \alpha + 2m \cos \alpha)4E_R/\hbar$. Sous réserve d'un bon choix des angles α et θ (par exemple, $\theta = \frac{\pi}{4}$ et $\alpha = \frac{\pi}{6}$), on peut s'assurer que les énergies des différentes transitions sont uniques selon une direction fixée ($\forall i \in \{x, y, z\}, \forall m, n, l, m', n', l', \tilde{\omega}_{m,n,l}^i \neq \tilde{\omega}_{m',n',l'}^i$), les transitions selon des directions différentes pouvant être distinguées par la direction du changement d'impulsions et étant donc contrôlées par des paires différentes de lasers.

On obtient finalement l'hamiltonien d'interaction à 3D, c'est-à-dire dans le cas le plus général qui nous intéresse :

$$\hat{H}_{eff}^I = \sum_{m,n,l} [t_{m,n,l}^x (e^{i\phi_{m,n,l}^x} |n+1,m,l\rangle\langle n,m,l| + e^{-i\phi_{m,n,l}^x} |n,m,l\rangle\langle n+1,m,l|) \\ + t_{m,n,l}^y (e^{i\phi_{m,n,l}^y} |n,m+1,l\rangle\langle n,m,l| + e^{-i\phi_{m,n,l}^y} |n,m,l\rangle\langle n,m+1,l|) \\ + t_{m,n,l}^z (e^{i\phi_{m,n,l}^z} |n,m,l+1\rangle\langle n,m,l| + e^{-i\phi_{m,n,l}^z} |n,m,l\rangle\langle n,m,l+1|)]$$

On s'est ici limité aux transitions entre plus proches voisins. On pourrait rajouter d'autres transitions entre des sites non-voisins. Cependant, les sites ne seraient alors pas individuellement résolus en énergie, et les transitions ne pourraient pas toutes être individuellement contrôlées (même si cela ne pose pas de problème dans le cas de transitions uniformes entre tous les sites).

3.3 Améliorations possibles du dispositif

Une amélioration possible du dispositif consiste à obtenir un contrôle des énergies des sites de l'hamiltonien effectif. La démarche pour réaliser cela est présentée dans (MEIER, AN, DAUPHIN et al. 2018) et consiste à regrouper les sites d'impulsion par paires. L'intensité du couplage intra-paire correspond à l'énergie du site dans l'hamiltonien effectif et le couplage inter-paires correspond au terme de couplage entre les deux sites. Une approche alternative consiste à générer un hamiltonien dépendant du temps en introduisant un léger désaccord en fréquence entre un laser et la résonance associée. À un changement de base près, on obtient ainsi des énergies sur site pouvant être contrôlées individuellement (MEIER, AN et GADWAY 2016).

Une telle possibilité est intéressante dans le contexte de la recherche spatiale sur un graphe, car elle permet l'implémentation physique d'un oracle, c'est-à-dire de l'opérateur permettant de "détecter" le site marqué (comme il a été fait dans YOUNG et al. 2022, bien que le dispositif utilisé soit différent). La manière la plus simple d'implémenter un tel opérateur est simplement de modifier l'énergie du site marqué.

3.4 Limites expérimentales

Une fois le dispositif décrit, une question reste à élucider : quel nombre de sites et combien d'étapes est-il possible de simuler ?

On peut distinguer deux types de limitations. Les premières concernent le nombre de sites pouvant être utilisés. En effet, les atomes sont détectés après leur chute, l'impulsion maximale détectable est donc limitée par la taille du détecteur. Cependant, obtenir un réseau avec quelques dizaines de sites de côté est largement possible et il n'est pas forcément intéressant de construire des réseaux plus grands pour l'instant (compte tenu du second type de limites sur le nombre d'étapes).

Le second type concerne le nombre d'étapes pouvant être simulées tout en préservant la cohérence du système (c'est-à-dire en s'assurant que les résultats obtenus sont en accord avec l'évolution théorique idéale et ne sont pas impactés par les imperfections expérimentales). Il y a au moins deux facteurs limitants sur celui-ci. Le premier est lié au temps de chute des atomes, c'est-à-dire le temps séparant la réalisation du condensat et le temps avant que les atomes ne sortent de la zone d'interaction avec les lasers sous l'action de la gravité. Cette zone ayant une dimension verticale de l'ordre du mm (en utilisant des lasers ayant un *waist* de l'ordre du cm, on a une intensité uniforme, i.e. un couplage constant au cours de l'évolution, sur une hauteur de l'ordre du mm), le temps de chute sous l'action de la gravité est de $15ms$ environ. Pour des oscillations de Rabi avec une période de l'ordre de $10\mu s$ (c'est-à-dire des pulses π sur un temps de $5\mu s$) , on peut s'attendre à observer quelques centaines de déplacements effectués.

Le second est lié à l'imperfection de la condensation dans un état d'impulsion nulle. La condensation n'étant pas parfaite, la distribution d'impulsion des atomes du condensat présente initialement un certain écart-type σ_p , qui va augmenter au fur et à mesure de l'interaction avec les lasers. Une fois que cet écart-type atteint la différence d'impulsion entre deux états, les états commencent à se superposer et ne peuvent plus être distingués, ne permettant pas d'extraire le résultat de la marche. Cet effet est bien moins limitant que le premier, mais dans le cas où on réussirait à augmenter le temps passé dans la zone d'interaction avec les lasers (par exemple, en suspendant les particules à l'aide d'un piège électrique ou magnétique), il deviendrait aussi limitant.

4 Étude de l'algorithme de Grover

4.1 L'algorithme de Grover (DTQW)

Une application prometteuse des marches aléatoires quantiques est la recherche d'un sommet dans un graphe, par exemple pour trouver un élément dans une base de données. L'algorithme le plus connu qui permet de réaliser cette tâche est l'algorithme de Grover (GROVER 1996). Il permet de retrouver l'indice d'un élément dans une liste de taille N avec une complexité en $O(\sqrt{N})$, ce qui représente une amélioration conséquente par rapport aux algorithmes classiques, qui réalisent cette opération en temps linéaire.

S'il n'est pas évident de comprendre en quoi l'algorithme de Grover est une marche aléatoire, on peut remarquer que cette amélioration quadratique de la complexité rappelle déjà les propriétés des DTQW présentées précédemment.

On considère donc une liste d'éléments $|i\rangle$, $i \in [1, N]$. On cherche dans cette liste un élément $|w\rangle$. L'algorithme fonctionne de la manière suivante.

L'algorithme de Grover est initialisé avec un état uniformément distribué sur l'ensemble de l'espace (une réalisation possible de cet état sera présentée plus tard). C'est une étape qu'on retrouve systématiquement dans les algorithmes de recherche à l'aide d'une marche aléatoire.

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle$$

Ensuite, on introduit deux opérateurs qui vont faire évoluer la particule. Le premier est l'oracle \hat{O} , qui transforme $|w\rangle$ en $-|w\rangle$. Le second, \hat{U} , réalise une inversion par la moyenne, à savoir une symétrie de la particule par rapport à la moyenne des coefficients des différents états.

$$\begin{aligned}\hat{O} &= 1 - 2|w\rangle\langle w| \\ \hat{U} &= 2|\psi_0\rangle\langle\psi_0| - 1 \\ \hat{H} &= \hat{U}\hat{O}\end{aligned}$$

En appliquant $\lfloor \frac{\pi}{4}\sqrt{N} \rfloor$ fois l'opérateur \hat{H} à ψ_0 , une mesure de la position de la particule renvoie l'état $|w\rangle$ avec une probabilité 1.

Il est possible de comprendre ce que fait l'algorithme grâce à la démonstration de sa correction.

On commence par réécrire ψ_0 de la manière suivante :

$$\begin{aligned}|\psi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} |w\rangle + \frac{\sqrt{N-1}}{\sqrt{N}} |u\rangle \\ |u\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i \neq w} |i\rangle\end{aligned}$$

On écrit alors :

$$\begin{aligned}|\psi_0\rangle &= \cos \theta_0 |u\rangle + \sin \theta_0 |w\rangle \\ \sin \theta_0 &= \frac{1}{\sqrt{N}}\end{aligned}$$

On se rend compte que l'algorithme de Grover fait opérer à la particule une rotation de l'état initial vers l'état cible.

Pour montrer cela, intéressons-nous au comportement de \hat{H} . On note

$$|\psi(\theta)\rangle = \cos \theta |u\rangle + \sin \theta |w\rangle$$

L'oracle réalise une symétrie par rapport à $|u\rangle$, on en déduit que :

$$\begin{aligned}\hat{O}|\psi(\theta)\rangle &= \cos\theta|u\rangle - \sin\theta|w\rangle \\ &= |\psi(-\theta)\rangle\end{aligned}$$

L'opérateur \hat{U} réalise quant à lui une symétrie par rapport à $|\psi_0\rangle = |\psi(\theta_0)\rangle$, on en déduit que :

$$\hat{U}|\psi(-\theta)\rangle = |\psi(\theta + 2\theta_0)\rangle$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}\hat{H}|\psi(\theta)\rangle &= |\psi(\theta + 2\theta_0)\rangle \\ \hat{H}^n|\psi(\theta_0)\rangle &= |\psi((2n+1)\theta_0)\rangle\end{aligned}$$

Or l'algorithme de Grover renvoie le bon résultat pour $|\psi(\theta)\rangle = |w\rangle$, autrement dit lorsque $\theta = \frac{\pi}{2}$. On cherche donc le nombre d'étapes n_{opt} tel que $|\psi_{n_{opt}}\rangle = |w\rangle$, on résout donc :

$$\frac{\pi}{2} = (2n_{opt} + 1)\theta_0$$

soit

$$\frac{\pi}{4n_{opt} + 2} = \arcsin\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

et en considérant $N \gg 1$, ce qui sera généralement le cas lors de l'utilisation de l'algorithme :

$$n_{opt} = \frac{\pi\sqrt{N}}{4}$$

On obtient donc bien une amélioration quadratique par rapport aux algorithmes classiques. Ici apparaît déjà l'importance du temps optimal au bout duquel la mesure est faite. Dans d'autres algorithmes, ce temps peut ne pas être connu exactement.

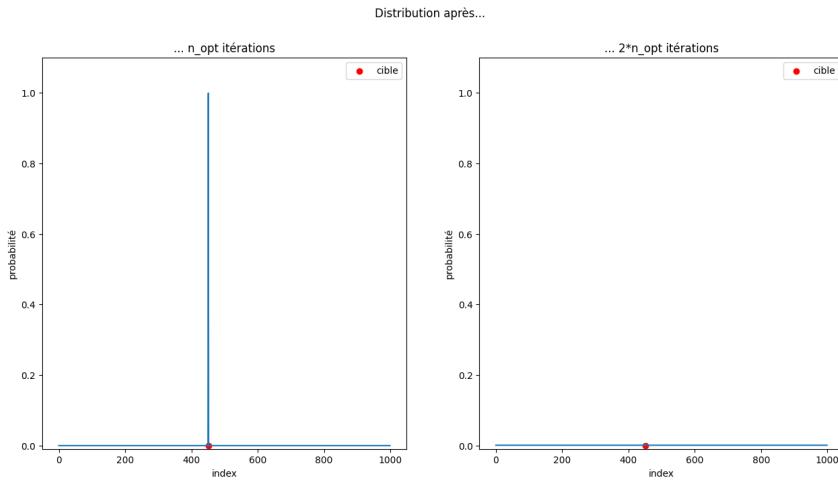


Fig. 10: Résultat de l'algorithme de Grover en fonction du nombre d'itérations

4.2 Initialisation de la marche

Le premier problème qui se pose si l'on veut adapter l'algorithme de Grover à l'expérience est l'initialisation de la marche. En effet, pour un algorithme de recherche, avoir une particule uniformément répartie sur le réseau est une initialisation récurrente dans les exemples que nous avons rencontrés. Or, dans l'expérience que nous étudions, le condensat d'atomes est au départ localisé sur un unique site.

Toutefois, une possibilité serait d'appliquer un hamiltonien bien choisi pour uniformiser la position de la particule au départ, avant d'appliquer un deuxième hamiltonien qui sera à l'origine de la marche.

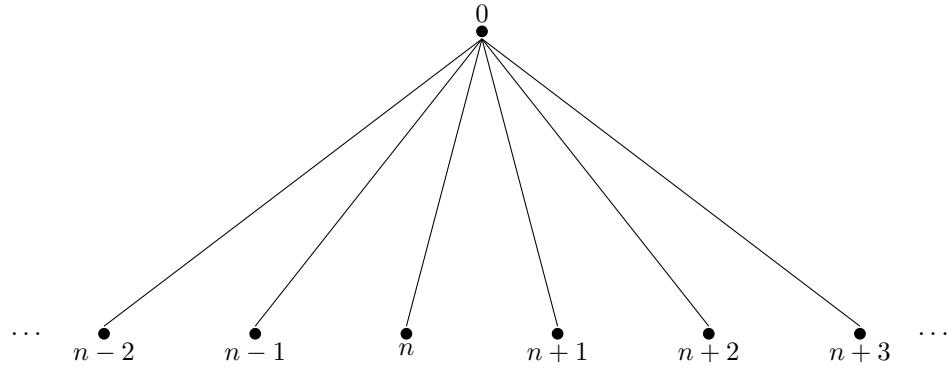


Fig. 11: Graphe utilisé pour l'initialisation sur tous les sommets

Considérons un réseau de $N + 1$ sites. On considère que la particule (la source) est à l'origine localisée sur le site $|0\rangle$. On introduit l'hamiltonien \hat{H} qui réalise un couplage Ω entre le site $|0\rangle$ et chaque site du réseau.

$$|\psi(0)\rangle = |0\rangle$$

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \hbar\Omega |j\rangle \langle 0| + \text{h.c.}$$

On note $|\psi(t)\rangle = \sum_{j=0}^N \alpha_j(t) |j\rangle$ et on cherche à déterminer $\alpha_0(t)$. On résout alors l'équation de Schrödinger :

$$i \frac{\partial \alpha_j(t)}{\partial t} = \Omega \alpha_0(t) \quad \forall j \in [1, N]$$

$$i \frac{\partial \alpha_0(t)}{\partial t} = \Omega \sum_{j=1}^N \alpha_j(t)$$

En dérivant la seconde équation, on obtient :

$$-\frac{\partial^2 \alpha_0(t)}{\partial t^2} = N\Omega^2 \alpha_0(t)$$

On en déduit qu'au bout d'un temps $T = \frac{\pi}{2\Omega\sqrt{N}} = \frac{u}{4\sqrt{N}}$ (avec u l'unité de la simulation), la particule est uniformément distribuée. On simule ce procédé en figure 12.

Néanmoins, tous les couplages ne sont pas autorisés dans le cadre de l'expérience. En effet, le couplage entre deux sites est défini par la différence d'énergie entre ces sites. Le site n possède une énergie $4n^2 E_r$, et donc la différence entre deux sites voisins $|n\rangle$ et $|n+1\rangle$ est $4E_r(2n+1)$. Cette différence est très avantageuse, car pour $n \neq m$, on aura le couplage $(n, n+1)$ bien distinct du couplage $(m, m+1)$, puisque $2n+1 \neq 2m+1$.

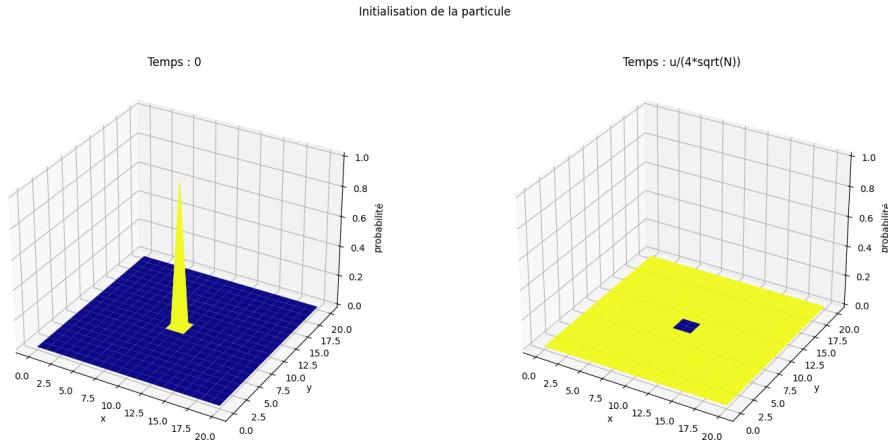


Fig. 12: Distribution sur les différents sites avant et après l'uniformisation

Toutefois, dans le cadre de l'uniformisation de la marche, on a besoin de couplages entre des sites non voisins. Considérons par exemple, à une dimension, le cas du site $n = 3$ depuis la source positionnée en 0. La différence d'énergie correspondante (divisée par le facteur commun $4E_R$) est $3^2 - 0^2 = 9$. Toutefois, lorsqu'on agit sur le couplage $(0, 3)$, on agira aussi sur le couplage $(4, 5)$, car $5^2 - 4^2 = 9$.

Mais ce cas ne se présente que pour les triplets pythagoriciens, qui sont relativement rares, et on peut espérer que les perturbations apportées par ce défaut ne seront pas significatives, ce qu'on constate sur la figure suivante.

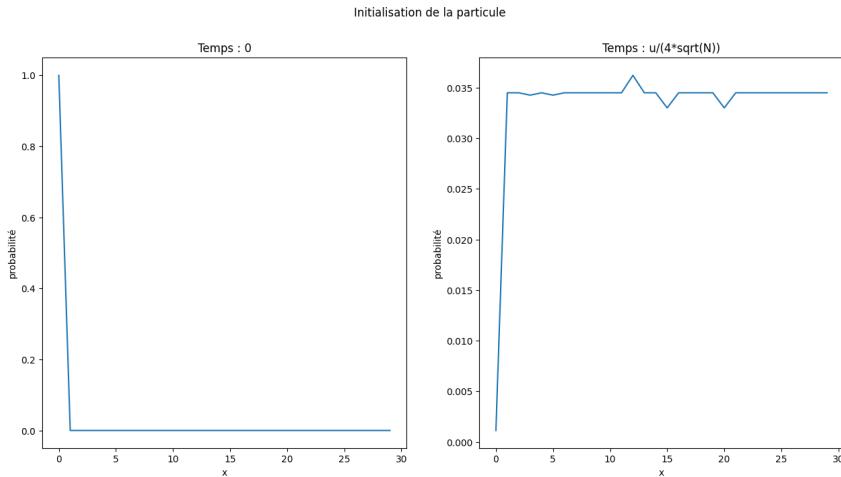


Fig. 13: Influence des couplages indésirables sur l'uniformisation du marcheur

On remarque qu'il y a effectivement des anomalies pour les triplets $(3, 4, 5)$ et $(12, 16, 20)$. Toutefois, ces anomalies ont de faibles amplitudes, et n'auront pas d'influence sur la marche.

Cela étant dit, il n'est pas facile expérimentalement d'implémenter un tel hamiltonien (surtout quand le nombre

de sites augmente) et nous commençons donc par ignorer cette contrainte et prendre une particule uniformément distribuée initialement. Nous commenterons la possibilité de nous contenter d'une initialisation gaussienne dans la section 4.4.

4.3 Mise au point d'un algorithme de recherche

On souhaite imaginer un algorithme de recherche d'un élément marqué $|w\rangle$ sur un réseau cubique à N sommets. Après l'initialisation de la particule, et sa répartition uniforme sur le réseau, on construit un hamiltonien qui va définir l'évolution de la marche. On cherchera ensuite à déterminer les paramètres optimaux de la marche (à savoir les coefficients de l'hamiltonien et le temps au bout duquel effectuer la mesure) en s'inspirant en partie de la démarche suivie dans MOGRABY et al. 2022.

L'hamiltonien choisi, $H(\gamma)$, couple de la même manière toutes les paires de voisins, sauf les paires qui contiennent le site cible, qui diffèrent des autres couplages d'un facteur γ . Ainsi, en une dimension, l'hamiltonien ressemble à ceci :

$$H(\gamma) = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

avec en bleu le terme diagonal correspondant au site ciblé (ici le site n°4).

Aussi simple cette approche soit-elle, elle semble déjà donner de bons résultats. La difficulté réside dans le choix des paramètres γ et τ . Dans la suite, on cherche à déterminer γ_{opt} et τ_{opt} et à évaluer les performances de l'algorithme, en fonction du nombre total N de sommets du réseau et de la dimension (1, 2 ou 3) du cube.

4.3.1 Dynamique de la marche

Avant d'essayer de trouver les paramètres optimaux, observons tout d'abord le comportement général de ces marches.

On se place à deux dimensions et on considère l'hamiltonien $\hat{H}(\gamma = 1.4)$ qui, nous le verrons, est proche de γ_{opt} pour un réseau à deux dimensions. Au temps τ_{opt} , on obtient la distribution suivante :

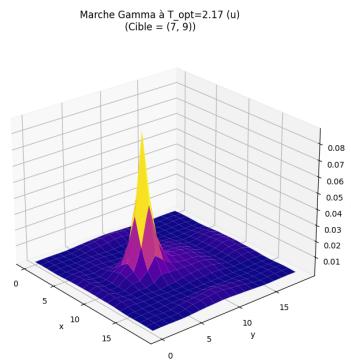


Fig. 14: Distribution de la marche pour $\gamma = 1.4$ après τ_{opt} pour la cible $(7, 9)$

On constate que la marche est un succès, sous réserve qu'on connaisse γ_{opt} et τ_{opt} . En effet, on obtient pour le site cible une probabilité presque égale à 0.1, ce qui est nettement supérieur à la probabilité moyenne des autres sites (pour un réseau cubique de côté $n = 20$, il y a $N = 400$ sites différents, soit une probabilité moyenne de $\frac{1}{400} = 0.0025 \ll 0.1$).

On peut aussi suivre la probabilité du site cible au cours du temps. On observe une dynamique cohérente qui laisse apparaître des résurgences temporelles (issues des interférences quantiques). En présence de dissipation, celles-ci disparaîtraient à temps longs, on se concentrera donc sur la première apparition temporelle. Il faut toutefois en même temps vérifier qu'il n'y a pas de site *fantôme*, à savoir un site qui n'est pas la cible, mais qui a tout de même une forte probabilité d'être détecté. Sur le graphe suivant, le *fantôme* correspond à la plus grande amplitude de probabilité qui n'est pas la cible.

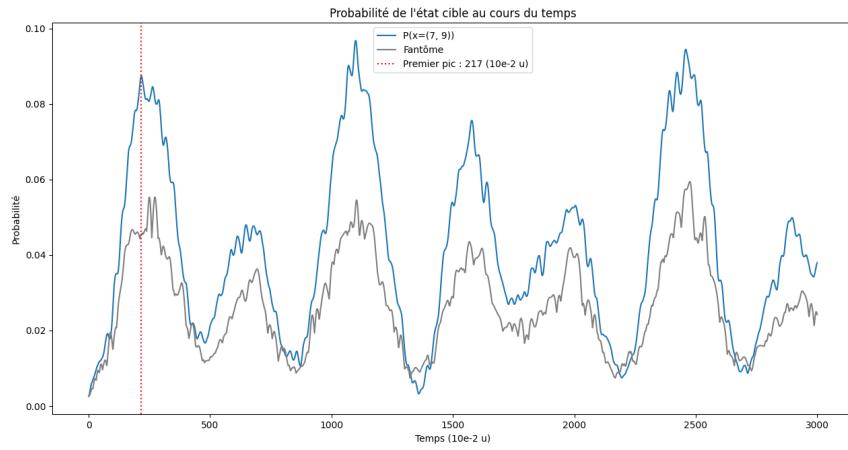


Fig. 15: Probabilité de l'état-cible et du *fantôme* en fonction du temps

Ce qu'on observe tout d'abord, c'est que le site fantôme reste significativement moins probable que le site cible. On remarque toutefois que les amplitudes du site cible et du site fantôme sont fortement corrélées. Cela vient simplement du fait que les principaux fantômes sont les voisins du site cible.

Aux alentours de $t = 1400 * 10^{-2} u$, on constate toutefois que le site cible a une amplitude de probabilité inférieure au site fantôme. Dans ce cas précis, on se rend compte que l'amplitude maximale sur le réseau est celle du centre du réseau.

Ainsi, ces premiers résultats semblent encourageants. Toutefois, il faut encore vérifier un point crucial : la position du site cible ne doit pas influer significativement sur les paramètres optimaux. En effet, on ne connaît pas au départ la position de la cible, si cette dernière est corrélée aux paramètres optimaux, il sera impossible de les déterminer. On trace donc, pour plusieurs cibles différentes, l'amplitude de probabilité de cette dernière au cours du temps.

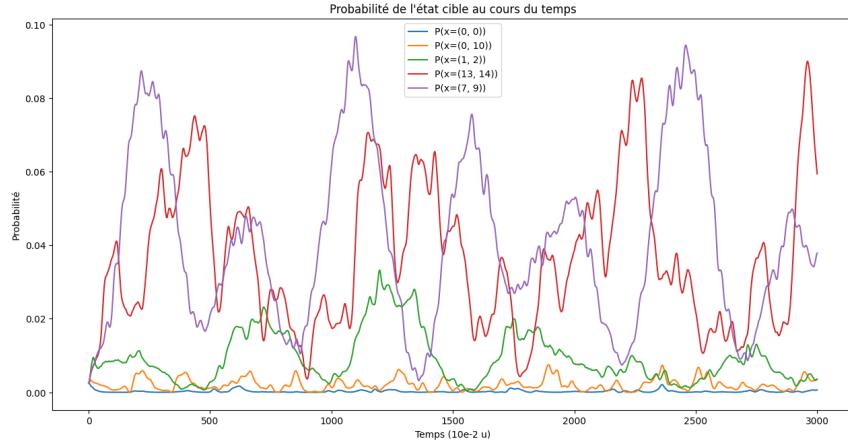


Fig. 16: Probabilité du site cible au cours du temps pour différents sites

On constate que la marche renvoie de moins bons résultats pour les cibles trop proches du bord (ce qui est logique, elles n'ont pas le même nombre de voisins que les sites au centre du réseau). Toutefois, on observe que pour des sites cibles relativement proches du centre du réseau, la probabilité à τ_{opt} reste importante, et, pour les différentes marches, τ_{opt} ne varie que peu. Quitte à réduire la taille des sites accessibles sur le réseau, on considérera dans la suite que les sites cibles ne sont pas trop près du bord.

4.3.2 Détermination de γ_{opt}

La question à laquelle on souhaite répondre ici est la suivante : comment choisir γ pour avoir un algorithme aussi efficace que possible ? On cherche à déterminer :

$$\gamma_{opt} = \gamma_{opt}(d, N, w)$$

Comme expliqué plus haut, on considère que le site cible $|w\rangle$ n'est pas trop proche du bord du réseau. Sa position n'a donc que peu d'influence sur la marche, et donc on peut considérer que γ_{opt} est indépendant de w . Ceci est d'ailleurs indispensable, car γ_{opt} doit être optimal pour tout w , puisqu'on ne connaît *a priori* pas w .

De plus, la dimension d ne peut prendre que 3 valeurs, puisque l'expérience que nous étudions ne peut pas simuler de marches à plus de trois dimensions. Et comme l'algorithme s'exécute en temps linéaire par rapport au nombre de sites du réseau en dimension 1, nous ne nous y intéresserons pas. Ainsi, il nous suffit de déterminer :

$$\begin{aligned}\gamma_{opt,2d} &= \gamma_{opt,2d}(N) \\ \gamma_{opt,3d} &= \gamma_{opt,3d}(N)\end{aligned}$$

Commençons par voir ce qu'il se passe à $N \simeq 400$ fixé, à 2 et 3 dimensions.

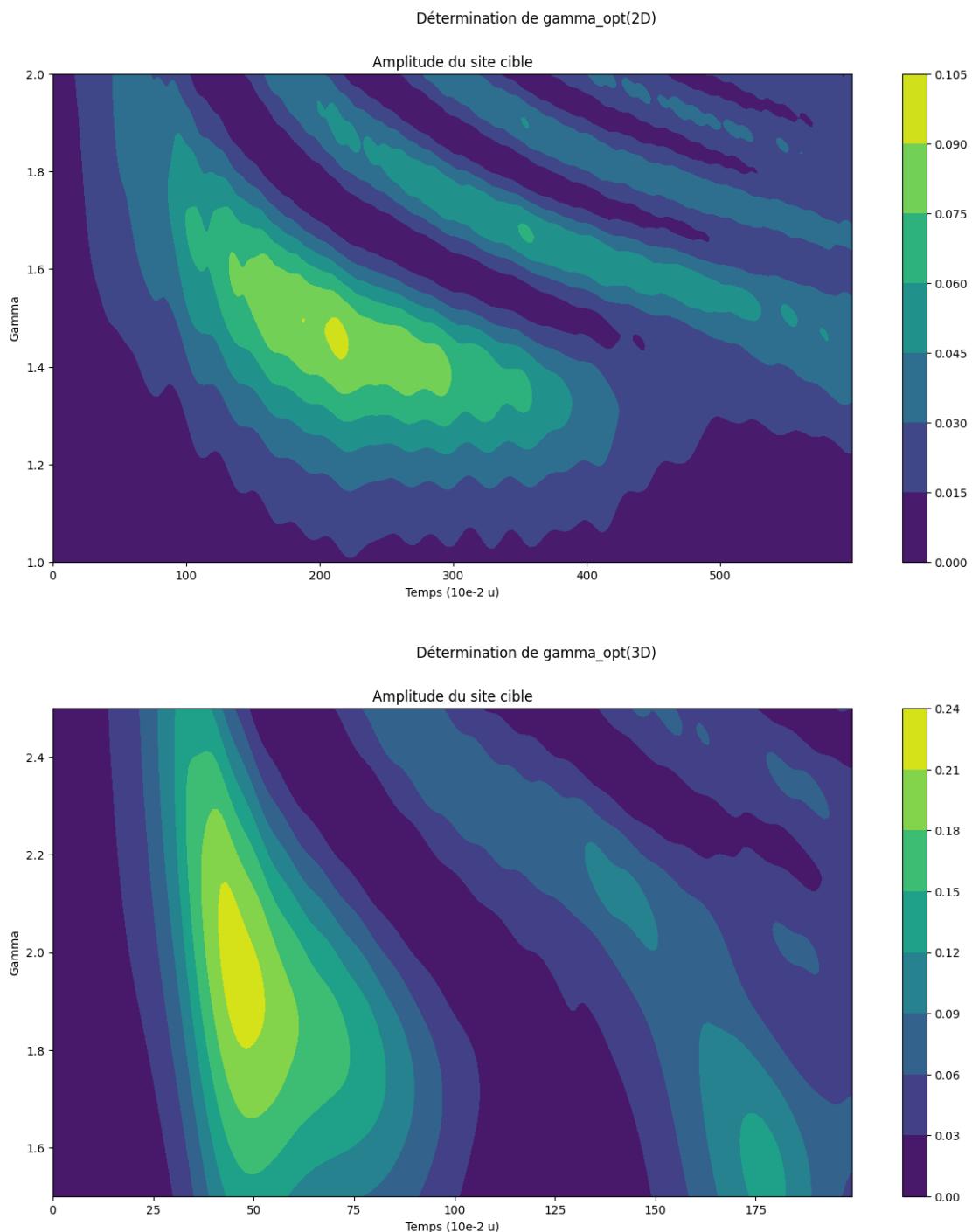


Fig. 17: Probabilité de trouver le site cible en fonction de γ et du temps à 2D (en haut) et à 3D (en dessous)

Ces graphes nous donnent une première idée de l'ordre de grandeur de ce coefficient γ_{opt} en 2 et 3 dimensions. Toutefois, il convient de tester la marche pour plusieurs valeurs de N et plusieurs cibles. On commence à 2 dimensions et on trace γ_{opt} en fonction de N , en espérant pouvoir en déduire l'expression de γ_{opt} .

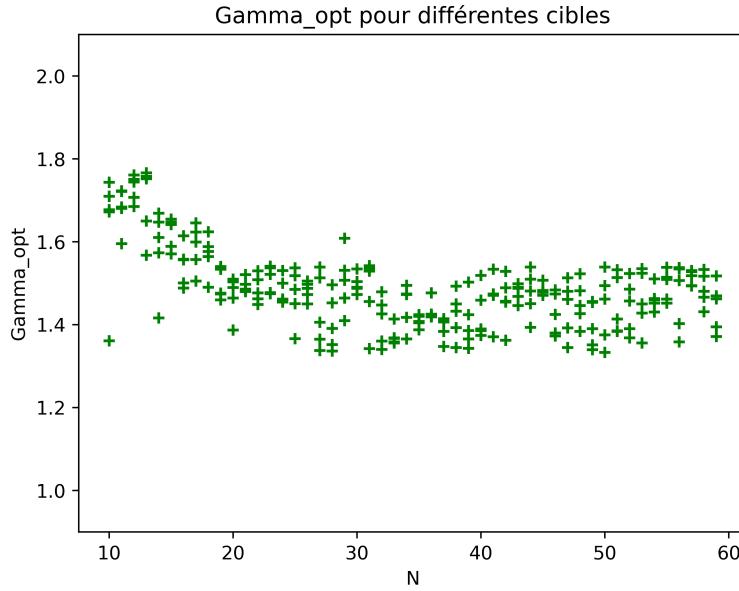


Fig. 18: Évolution du paramètre γ_{opt} à 2D en fonction du nombre de sites par côté

Ce dont on se rend compte, c'est qu'en réalité γ_{opt} ne dépend pas de la taille du réseau. On pouvait le soupçonner avant de faire tourner la simulation. L'impact du coefficient γ sur la marche est très *local*, puisqu'il n'implique que le site cible et ses voisins. γ a bien une forte influence sur le résultat de l'algorithme, mais c'est bien parce que le résultat de l'algorithme, à savoir l'amplitude de probabilité d'un unique site, est une propriété locale.

4.3.3 Détermination de τ_{opt}

Maintenant que γ_{opt} est connu, il s'agit de déterminer τ_{opt} . De même qu'avant, on le détermine en utilisant nos simulations (ici à 2 dimensions).

Après avoir simulé des marches pour des tailles de différents réseaux, des régressions puissances nous ont confirmé que τ_{opt} possédait une dépendance en \sqrt{N} . On obtient ainsi les figures 19 et 20.

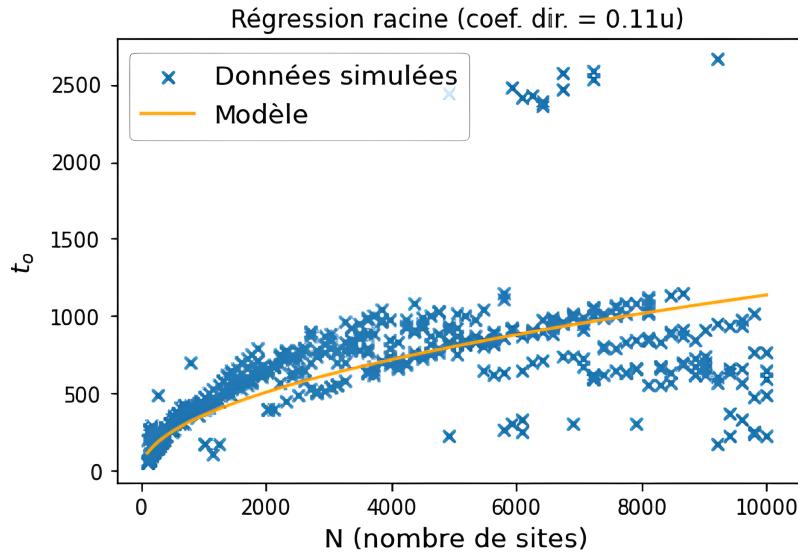


Fig. 19: Évolution du paramètre τ_{opt} à 2D en fonction de N nombre total de sites

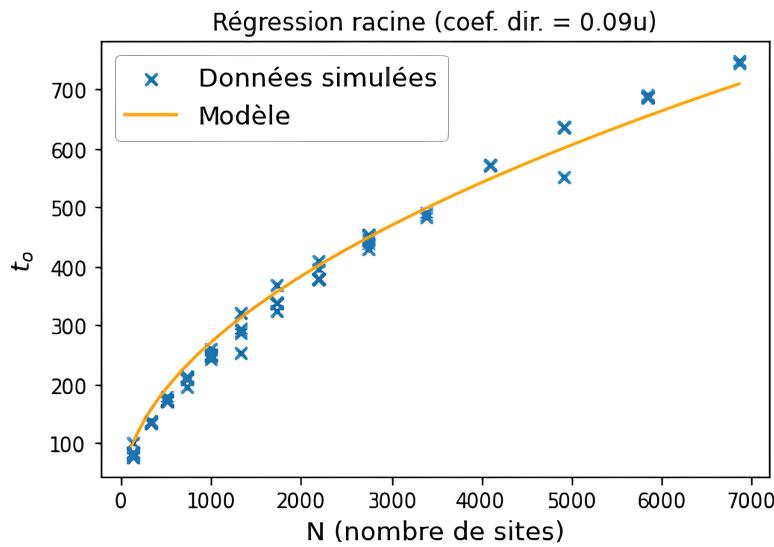


Fig. 20: Évolution du paramètre τ_{opt} à 3D en fonction de N nombre total de sites

On en déduit ainsi les paramètres optimaux :

$$\begin{aligned}\gamma_{opt,2d} &= 1.4 \\ \gamma_{opt,3d} &= 2.0 \\ \tau_{opt,2d}(N) &= 0.11\sqrt{Nu} \\ \tau_{opt,3d}(N) &= 0.09\sqrt{Nu}\end{aligned}$$

4.3.4 Limites de l'algorithme

Les résultats précédents indiquent une complexité exceptionnelle de notre algorithme. Il s'agit toutefois de nuancer ces résultats.

Premièrement, nos simulations informatiques en PYTHON ont des complexités temporelles et spatiales conséquentes. Pour tester les réseaux cubiques par exemple, il est difficile de dépasser un réseau de côté $n = 20$, puisqu'un réseau tel réseau correspond à un espace de Hilbert de dimension $N = 8000$, donc un hamiltonien à $8000^2 = 64 \cdot 10^6$ coefficients, dont il faut calculer l'exponentielle. Ainsi, nous n'avons pas pu tester la simulation au-delà.

Deuxièmement, le résultat de notre algorithme est donné par la distribution de probabilité sur l'ensemble des positions du réseau. L'amplitude de probabilité du site cible est non seulement la plus importante sur l'ensemble du réseau, mais elle est aussi 10 à 100 fois supérieure à l'amplitude moyenne de l'ensemble des sites (soit $\frac{1}{N}$ sur un ensemble de N sites). Il s'agit donc de détecter le site qui est plus probable que les autres. Mais plus les amplitudes de probabilité des sites du réseau sont faibles, plus le nombre de particules dont il faudra mesurer la position sera grand. Ce nombre de particules varie même linéairement avec le nombre de sites du réseau. C'est ici que la capacité de mesurer individuellement l'impulsion (à trois dimensions) de chaque particule d'un condensat de 10^6 atomes est particulièrement intéressante.

Toutefois, cette *complexité matérielle* est sans doute moins contraignante que la complexité temporelle dans le cadre de futures applications, et notre algorithme crée une réelle amélioration en termes de complexité temporelle.

4.4 Étude avec initialisation gaussienne

Bien que l'initialisation uniforme soit optimale pour avoir de bons résultats à l'issue de la recherche, et puisse être obtenue théoriquement, elle est difficile à implémenter expérimentalement du fait de l'hamiltonien utilisé.

Cependant, une autre approche consiste à initialiser le système à l'aide d'un isolant de Mott bosonique. Un tel système permet d'obtenir une distribution des atomes suivant une gaussienne dans l'espace des impulsions (CARCY et al. 2019), avec un écart-type recouvrant typiquement quelques sites d'impulsion, à savoir $\sigma_p \simeq \alpha \Delta p$, avec Δp l'écart en impulsion entre deux sites voisins et α un facteur numérique de l'ordre de quelques unités, pour lequel on prendra typiquement $\alpha = 2$.

Nous avons donc étudié les résultats de notre algorithme avec une telle initialisation pour voir si les performances obtenues avec une initialisation uniforme étaient maintenues. On considère donc un marcheur initialement réparti selon une gaussienne d'écart-type assez faible devant la taille du réseau, i.e. $\sigma = 2$. Le site cible est choisi de telle sorte à être situé suffisamment loin de l'origine, par rapport à l'écart-type de la gaussienne. On observe l'état de la particule plus tard dans la marche sur la figure 21. On constate que le site cible présente toujours un pic de probabilité, ce qui est rassurant quant au fonctionnement de l'algorithme. Il s'agit donc désormais d'étudier la dépendance en temps du temps optimal τ_{opt} au bout duquel observer le résultat de la marche pour trouver le site cible, en fonction de la dimension d du réseau et de son nombre N de sommets.

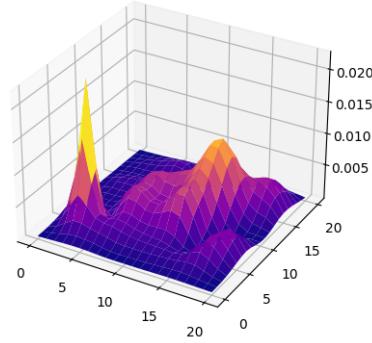


Fig. 21: Répartition de la marche aléatoire avec initialisation gaussienne à 2D, le site cible étant le site (5, 3)

Dans la suite, il y a des erreurs dans les légendes temporelles des plots, le pas de temps est bien à chaque fois de $10^{-2}u$.

4.4.1 Étude à 1D

Le cas unidimensionnel est certainement le cas pour lequel les résultats sont les moins bons. Une piste d'explication est que le nombre de voisins est beaucoup plus faible à une dimension. Or, du fait de l'hamiltonien choisi pour guider la marche, qui augmente le couplage du site cible à ses voisins (par rapport aux couplages uniformes sur le reste du réseau), la capacité du site cible à capter les particules depuis les autres sites dépend de son nombre de voisins. De plus, la distribution initiale est d'autant moins étalée que la dimension du réseau est faible : à 1D, une gaussienne d'écart-type égal à 1 s'étale significativement sur 3 sites environ, contre de l'ordre de 9 à 2D, et plus de 27 à 3D.

Ainsi, il va être difficile d'effectuer une analyse asymptotique sur une marche à une dimension, puisque que l'algorithme ne parvient rapidement plus à renvoyer un bon résultat. Toutefois, pour de petites tailles de réseau (de l'ordre de ce qui pourrait être atteint en laboratoire), l'algorithme est encore valide. Les figures 22 et 23 présentent les évolutions des probabilités respectivement pour un réseau à 10 et 20 sites.

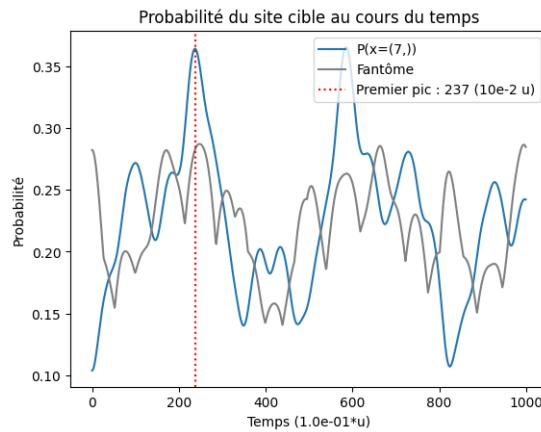


Fig. 22: Évolution de la probabilité du site cible et du premier site *fantôme* en fonction du temps pour un réseau à $N = 10$ sommets

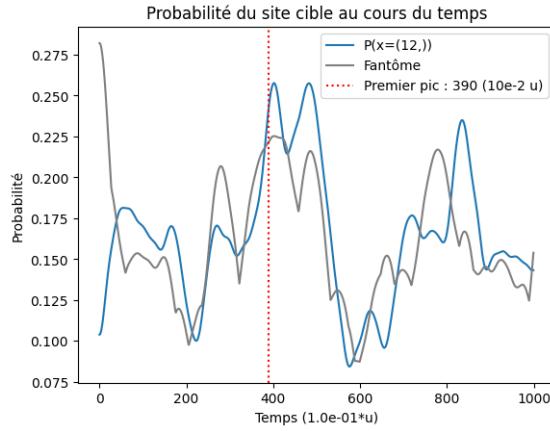


Fig. 23: Évolution de la probabilité du site cible et du premier site *fantôme* en fonction du temps pour un réseau à $N = 20$ sommets

Pour $N \leq 10$, les sites fantômes restent avec une probabilité inférieure au site cible, mais pour $N < 20$, il devient nécessaire de prêter attention à l'instant de la mesure, car un mauvais choix peut conduire à l'obtention d'un mauvais site (si le bon site n'est pas obtenu, c'est en général son voisin qui est mesuré). Heureusement, on ne retrouve pas ce problème dans les dimensions supérieures, où l'algorithme est plus régulier dans les résultats qu'il renvoie. Ainsi, notre algorithme pourrait tout de même être utilisé pour une démonstration de principe à une dimension, tout en gardant à l'esprit qu'il est plus performant à 2 et 3 dimensions, ce qui souligne d'autant plus l'intérêt du dispositif de l'Institut d'Optique, qui permet justement l'accès à ces dimensions.

Il reste encore à vérifier à l'aide de nos simulations que le comportement asymptotique de notre algorithme reste en $O(\sqrt{N})$ avec N le nombre de sites du réseau. Nous allons maintenant vérifier si ce comportement est conservé à 2 et 3 dimensions (pour lesquelles les résultats de la marche nous le permettent).

4.4.2 Étude à 2D et 3D

On simulera nos marches à partir d'un écart-type de 2. Pour le cas limite $\sigma \gg n$ (avec n le côté du réseau), on retrouve l'initialisation uniforme pour notre algorithme, qui a déjà été étudiée et qui fonctionne très bien. Mais pour $\sigma \ll n$, on obtient quelque chose de similaire à l'initialisation de la particule en un point unique, pour lequel l'algorithme ne fonctionne pas. Le cas $\sigma \simeq 1$ correspond à un entre-deux, et il est difficile de savoir comment l'algorithme va se comporter. On sait déjà qu'il renvoie toujours le bon résultat, mais la question se pose de connaître le temps d'exécution nécessaire.

On peut s'attendre à une perte d'efficacité de l'algorithme dû au temps nécessaire à la particule pour se délocaliser (dans l'espace des impulsions) au début de l'algorithme, afin d'explorer le réseau. On commence donc par s'intéresser à l'écart type de la particule au cours du temps, en partant d'une particule initialement entièrement localisée au centre du réseau (ce qui correspondrait au cas limite $n \gg 1$).

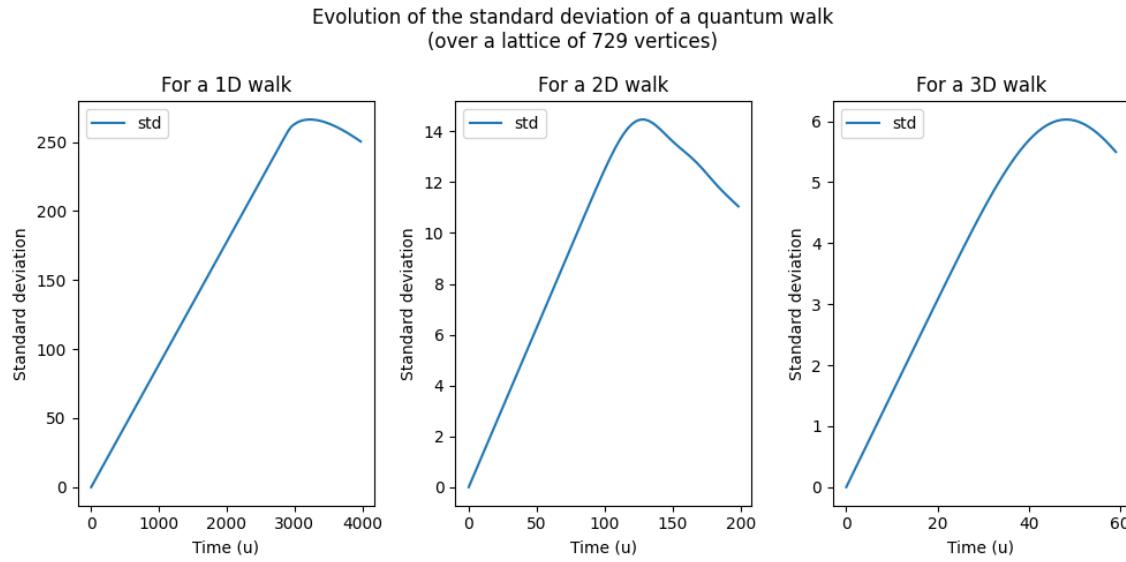


Fig. 24: Évolution de l'écart-type de la distribution du marcheur en fonction du temps de la marche à 1D, 2D, 3D (de gauche à droite)

Comme attendu, la particule s'étale de manière linéaire en fonction du temps (jusqu'à ce que les effets de bord se fassent ressentir au niveau de la valeur maximale de l'écart-type). On retrouve l'accélération quadratique par rapport au cas classique, mais il faut encore vérifier que cette accélération se traduit en effet en une accélération de l'algorithme de recherche.

La figure 25 montre la dépendance de τ_{opt} par rapport au nombre N de sommets du réseau. L'objectif (et l'espérance) est de retrouver une complexité en $O(\sqrt{N})$. On effectue de plus une régression puissance sur les simulations pour obtenir la dépendance en N .

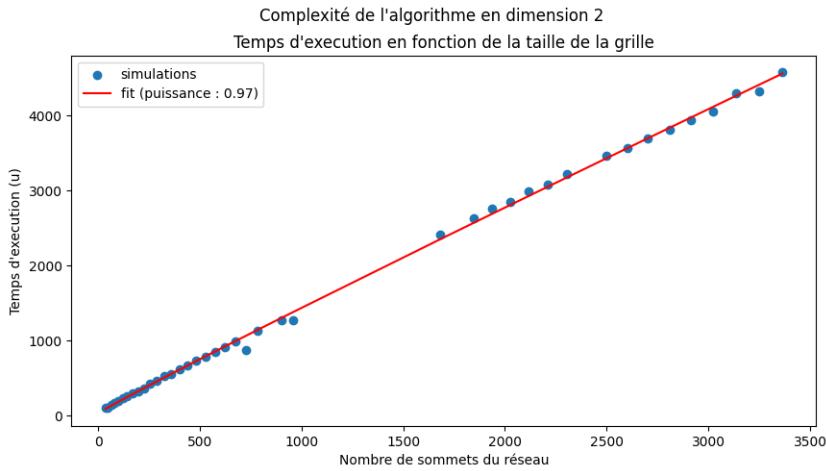


Fig. 25: Évolution de τ_{opt} en fonction de N à 2D

On observe que la complexité est furieusement linéaire (on retrouve le même résultat à 3D), et ne présente donc aucun avantage par rapport au cas classique. Il n'est pas évident d'expliquer ce résultat décevant, puisque l'écart-type augmente linéairement avec le temps, alors qu'à deux dimensions la distance moyenne des sommets du réseau par rapport au centre du réseau évolue en \sqrt{N} , avec N le nombre de sommets du réseau. On s'attend donc à atteindre une situation équivalente à une initialisation uniforme en un temps sous-linéaire, ce qui devrait se traduire par une complexité sous-linéaire.

Le problème vient en réalité des effets de bord. En effet, ce sont ceux-ci qui viennent ralentir l'étalement de la particule, par effets d'interférence de la particule qui est renvoyée à elle-même après avoir rebondi sur les limites du réseau. C'est ce phénomène qui est problématique pour notre algorithme.

Élaboration d'une nouvelle stratégie : On souhaite retrouver l'état initial uniformément distribué afin de pouvoir réaliser notre marche en un temps sous-linéaire. On a donc besoin de se débarrasser des effets de bord. Les trois points suivants vont nous permettre d'y parvenir, ou tout du moins d'obtenir un état initial proche de cet état uniforme :

- Un état initial uniformément distribué peut être approché par une gaussienne d'écart-type grand devant le côté du réseau.
- Un état initial de distribution gaussienne avec $\sigma \geq 2$ (pour que l'état initial soit réparti sur plusieurs sites du réseau) auquel on applique un hamiltonien où tous les sites sont couplés de la même manière à leurs voisins s'étale de manière régulière (en restant une gaussienne) et voit son écart-type croître linéairement, et ce jusqu'à ce que les effets de bord entrent en jeu.
- Pour deux réseaux de côtés n_1 et n_2 , des distributions gaussiennes d'écart-type $\sigma_1 = n_1$ et $\sigma_2 = n_2$ correspondront à la même distribution, à un facteur d'échelle près. Autrement dit, la gaussienne d'écart-type σ_1 est aussi bien distribuée sur un réseau de côté n_1 qu'une gaussienne d'écart-type σ_2 distribuée sur un réseau de côté n_2 .

Voici donc une nouvelle stratégie qui permet d'obtenir à nouveau une complexité sous-linéaire sur un réseau à N sites (donc de côté $n = N^{\frac{1}{d}}$):

- initialisation gaussienne de la particule ($\sigma = 2$)
- sur un réseau de côté $3N^{\frac{1}{d}}$ avec des probabilités de transition uniforme entre deux sites voisins, on laisse évoluer la particule jusqu'à ce que sa distribution ait un écart-type de l'ordre de $N^{\frac{1}{d}}$. Puisque l'écart-type évolue linéairement (on s'est débarrassé des effets de bord en élargissant le réseau), la complexité de cette étape est en $O(N^{\frac{1}{d}})$.
- On modifie ensuite l'hamiltonien en coupant les couplages entre sites en dehors du réseau de côté $N^{\frac{1}{d}}$ et en utilisant l'hamiltonien de recherche défini précédemment $H(\gamma)$. Au bout d'un temps en $O(\sqrt{N})$, on sera en mesure d'identifier le site cible.

Ainsi, pour $d > 1$, on obtient bien un algorithme en $O(\sqrt{N})$, ce qui présente une amélioration par rapport au cas classique. Tout l'intérêt de cette nouvelle approche est de tenter de retirer l'impact des effets de bord sur la marche afin de retrouver le comportement d'une marche initialisée de manière uniforme. Notons aussi que l'on n'obtient pas exactement une complexité en $O(\sqrt{N})$ puisque ce n'est le cas que pour $\sigma = \infty$, alors que pour $\sigma = 2$ la complexité est linéaire. La complexité réelle de notre algorithme se situe alors quelque part entre ces deux cas limites, mais reste bien sous-linéaire. La figure 26 montre les résultats obtenus avec cette approche.

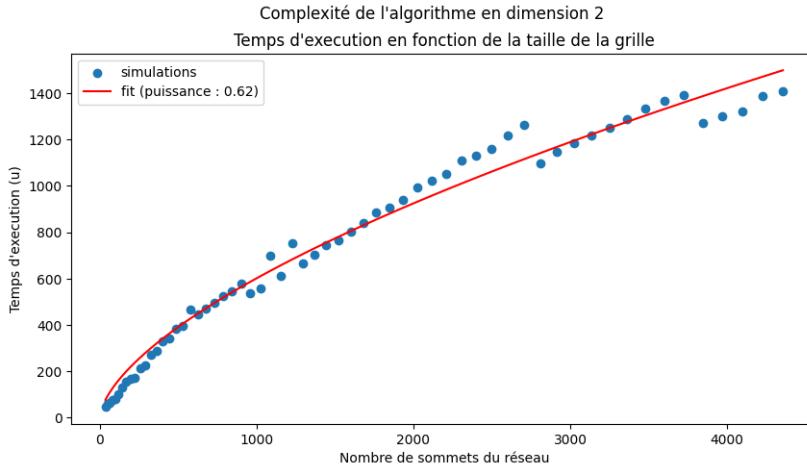


Fig. 26: Évolution de τ_{opt} en fonction de N à 2D avec la nouvelle initialisation

Enfin, il est important de noter quelques questions encore ouvertes. Tout d'abord, si $\sigma = 2$ permet de conserver approximativement une gaussienne lorsqu'on laisse la particule s'étaler, $\sigma = 1$ ne le permet pas. Il est donc légitime de se demander dans quelle mesure $\sigma = 2$ est effectivement suffisant, et surtout jusqu'à quel écart-type. Ensuite, nos régressions sont difficiles à effectuer, et ce pour deux raisons. La première est due à la complexité de la simulation, qui nous empêche de simuler aussi loin que l'on voudrait. La seconde est due à la manière dont nous obtenons le temps optimal, qui n'est pas évident à distinguer à l'oeil nu sur nos graphes, et que notre algorithme a souvent plus de mal encore à identifier correctement.

5 Conclusion

La question à laquelle nous voulions répondre au cours de ce PSC était la suivante : comment trouver une application à l'expérience étudiée qui profite des opportunités que le dispositif offre, à savoir la possibilité de faire des marches aléatoires continues en trois dimensions ?

Si nous ne sommes pas parvenus à trouver dans la littérature scientifique d'application des marches aléatoires quantiques qui respecte les contraintes liées au dispositif expérimental, qui gagne à utiliser une marche en trois dimensions et qui présente un avantage par rapport aux algorithmes classiques, nous avons tout de même pu nous inspirer de l'article MOGRABY et al. 2022 pour imaginer notre propre algorithme.

Grâce aux simulations que nous avons développées, nous avons pu tester notre algorithme, en déterminer les paramètres optimaux et en estimer la complexité. Si la complexité des simulations ne permettait pas de faire une étude asymptotique du problème, nous avons quand même pu expérimenter avec des réseaux de 10000 sites.

Une manière de poursuivre ce PSC serait de reprendre les différentes applications que nous avons croisées et que nous avons écartées parce qu'elles ne satisfaisaient pas les contraintes de l'expérience, et de s'autoriser cette fois-ci certains types de transitions, envisageables d'un point de vue expérimental, que nous nous étions interdits jusque-là. Par exemple, l'utilisation de transitions entre sites non voisins permettrait d'élargir le spectre des graphes que nous pouvions simuler jusqu'ici. D'autres options seraient de modifier les termes diagonaux de notre hamiltonien effectif en jouant sur la résonance des transitions avec les lasers, ou encore de considérer les spins au sein de l'expérience, ce qui permettrait de réaliser l'algorithme proposé par CHILDS et GOLDSTONE 2004. La simulation de graphes orientés pourrait aussi être envisagée (avec une application possible à l'algorithme PageRank, qui permet de sonder la structure du web).

Les optimisations possibles sont ainsi très nombreuses et l'amélioration continue des outils physiques pour la manipulation précise d'atomes ouvre de nouvelles opportunités très intéressantes pour la simulation quantique.

Enfin, nous tenons à remercier M. David Clément d'avoir pris de son temps pour encadrer ce PSC et pour ses éclairages aussi intéressants qu'indispensables sur le sujet.

Bibliographie

- [Asp+] Alain ASPECT et al. *Quantum Optics 1 - Lasers*. Département de Physique, École Polytechnique.
- [Car+19] Cé cile CARCY et al. ?Momentum-Space Atom Correlations in a Mott Insulator? In : *Physical Review X* 9.4 (nov. 2019). DOI : 10.1103/physrevx.9.041028. URL : <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevx.9.041028>.
- [CG04] Andrew M. CHILDS et Jeffrey GOLDSTONE. ?Spatial search and the Dirac equation? In : *Physical Review A* 70.4 (oct. 2004). DOI : 10.1103/physreva.70.042312. URL : <https://doi.org/10.1103%2Fphysreva.70.042312>.
- [Ehr+21] Max EHRHARDT et al. ?Exploring complex graphs using three-dimensional quantum walks of correlated photons? In : *Science Advances* 7.9 (2021), eabc5266. DOI : 10.1126/sciadv.abc5266. URL : <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/sciadv.abc5266>.
- [EBH22] C. ESPOSITO, M.R. BARROS et A. Durán HERNÁNDEZ. ?Quantum walks of two correlated photons in a 2D synthetic lattice? In : *npj Quantum Information* 8 (2022). DOI : 10.1038/s41534-022-00544-0.
- [Fri+21] Massimo FRIGERIO et al. ?Generalized quantum-classical correspondence for random walks on graphs? In : *Physical Review A* 104.3 (sept. 2021). DOI : 10.1103/physreva.104.1030201. URL : <https://doi.org/10.1103%2Fphysreva.104.1030201>.
- [Gad15] Bryce GADWAY. ?Atom-optics approach to studying transport phenomena? In : *Phys. Rev. A* 92 (4 oct. 2015), p. 043606. DOI : 10.1103/PhysRevA.92.043606. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.92.043606>.
- [Gro96] Lov K. GROVER. *A fast quantum mechanical algorithm for database search*. 1996. DOI : 10.48550/ARXIV.QUANT-PH/9605043. URL : <https://arxiv.org/abs/quant-ph/9605043>.
- [Jia+21] Zhi-Qiang JIAO et al. ?Two-dimensional quantum walks of correlated photons? In : *Optica* 8.9 (sept. 2021), p. 1129-1135. DOI : 10.1364/OPTICA.425879. URL : <https://opg.optica.org/optica/abstract.cfm?URI=optica-8-9-1129>.
- [Kar+09] Michal KARSKI et al. ?Quantum Walk in Position Space with Single Optically Trapped Atoms? In : *Science* 325.5937 (2009), p. 174-177. DOI : 10.1126/science.1174436. eprint : <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.1174436>. URL : <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1174436>.
- [Mei+18] Eric J. MEIER, Fangzhao Alex AN, Alexandre DAUPHIN et al. ?Observation of the topological Anderson insulator in disordered atomic wires? In : *Science* 362.6417 (nov. 2018), p. 929-933. DOI : 10.1126/science.aat3406. URL : <https://doi.org/10.1126%2Fscience.aat3406>.
- [MAG16] Eric J. MEIER, Fangzhao Alex AN et Bryce GADWAY. ?Atom-optics simulator of lattice transport phenomena? In : *Physical Review A* 93.5 (mai 2016). DOI : 10.1103/physreva.93.051602. URL : <https://doi.org/10.1103%2Fphysreva.93.051602>.
- [Mog+22] Gamal MOGRABY et al. *Quantitative approach to Grover's quantum walk on graphs*. 2022. arXiv : 2207.01686 [math-ph].
- [PRR05] Apoorva PATEL, K. S. RAGHUNATHAN et Pranaw RUNGTA. ?Quantum random walks do not need a coin toss? In : *Physical Review A* 71.3 (mars 2005). DOI : 10.1103/physreva.71.032347. URL : <https://doi.org/10.1103%2Fphysreva.71.032347>.
- [Pre+15] Philipp M. PREISS et al. ?Strongly correlated quantum walks in optical lattices? In : *Science* 347.6227 (mars 2015), p. 1229-1233. DOI : 10.1126/science.1260364.

- [Sch+12] Andreas SCHREIBER et al. ?A 2D Quantum Walk Simulation of Two-Particle Dynamics? In : *Science* 336.6077 (2012), p. 55-58. DOI : 10.1126/science.1218448. URL : <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1218448>.
- [Str06] Frederick W. STRAUCH. ?Connecting the discrete- and continuous-time quantum walks? In : *Physical Review A* 74.3 (sept. 2006). DOI : 10.1103/physreva.74.030301. URL : <https://doi.org/10.1103/2Fphysreva.74.030301>.
- [Tén21] Antoine TÉNART. ?Momentum-space correlations in the depletion of weakly interacting lattice Bose gases? 2021UPASP128. Thèse de doct. 2021. URL : <http://www.theses.fr/2021UPASP128/document>.
- [Wan13] Yan WANG. ?Simulating Stochastic Diffusions by Quantum Walks? In : t. 3. Août 2013. DOI : 10.1115/DETC2013-12739.
- [You+22] Aaron W. YOUNG et al. ?Tweezer-programmable 2D quantum walks in a Hubbard-regime lattice? In : *Science* 377.6608 (août 2022), p. 885-889. DOI : 10.1126/science.abo0608. URL : <https://doi.org/10.1126%2Fscience.abo0608>.

Liste des figures

1	Distribution d'une marche aléatoire classique à temps discret après 100 pas	6
2	Distribution de la marche quantique à temps discret après 100 pas pour $ \psi_0\rangle = 0, \uparrow\rangle$	8
3	Distribution de la marche quantique à temps discret après 100 pas pour $ \psi_0\rangle = \frac{1}{2}(0, \uparrow\rangle + i 0, \downarrow\rangle)$. .	9
4	Comparaison de l'écart-type de la distribution d'une marche classique vs. quantique	9
5	Comparaison d'un phénomène de diffusion classique vs. quantique	10
6	Schéma de la discréétisation à 1D	12
7	Schéma de la discréétisation à 2D	14
8	Disposition des lasers contrôlant l'évolution (depuis Gadway 2015)	16
9	Structure des niveaux d'énergie de la particule (depuis Gadway 2015)	17
10	Résultat de l'algorithme de Grover en fonction du nombre d'itérations	21
11	Graphe utilisé pour l'initialisation sur tous les sommets	22
12	Distribution sur les différents sites avant et après l'uniformisation	23
13	Influence des couplages indésirables sur l'uniformisation du marcheur	23
14	Distribution de la marche pour $\gamma = 1.4$ après τ_{opt} pour la cible (7, 9)	24
15	Probabilité de l'état-cible et du fantôme en fonction du temps	25
16	Probabilité du site cible au cours du temps pour différents sites	26
17	Probabilité de trouver le site cible en fonction de γ et du temps à 2D (en haut) et à 3D (en dessous) .	27
18	Évolution du paramètre γ_{opt} à 2D en fonction du nombre de sites par côté	28
19	Évolution du paramètre τ_{opt} à 2D en fonction de N nombre total de sites	29
20	Évolution du paramètre τ_{opt} à 3D en fonction de N nombre total de sites	29
21	Répartition de la marche aléatoire avec initialisation gaussienne à 2D, le site cible étant le site (5, 3) .	31
22	Évolution de la probabilité du site cible et du premier site fantôme en fonction du temps pour un réseau à $N = 10$ sommets	31
23	Évolution de la probabilité du site cible et du premier site fantôme en fonction du temps pour un réseau à $N = 20$ sommets	32
24	Évolution de l'écart-type de la distribution du marcheur en fonction du temps de la marche à 1D, 2D, 3D (de gauche à droite)	33
25	Évolution de τ_{opt} en fonction de N à 2D	33
26	Évolution de τ_{opt} en fonction de N à 2D avec la nouvelle initialisation	35