

PHY14 : Simulation de marches aléatoires à l'aide de condensats d'atomes froids

Rapport final

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

Avril 2023

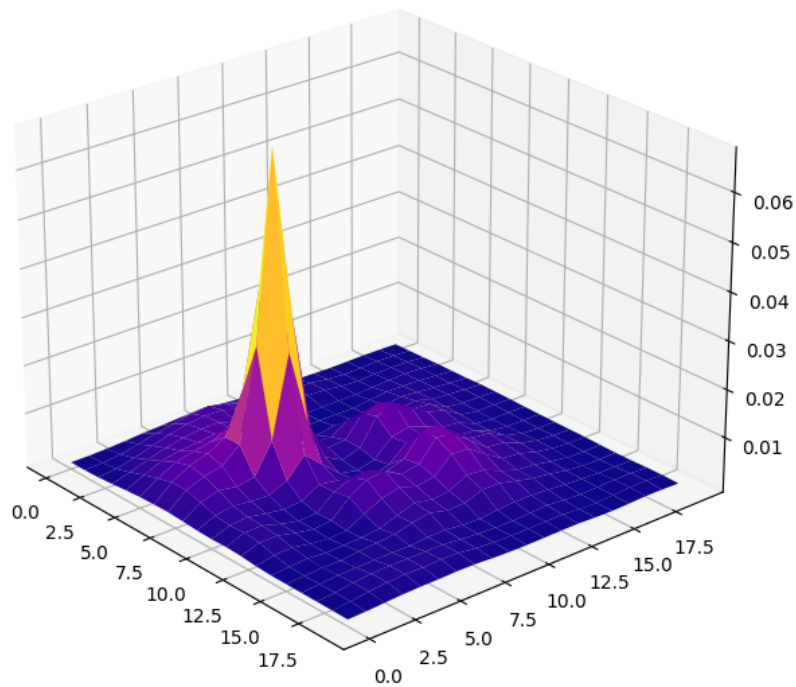


Table des matières

1	Introduction	3
1.1	Motivation du sujet	3
1.2	Résultats obtenus	3
1.3	Présentation du formalisme	3
1.3.1	Marche aléatoire classique discrète (DTRW)	4
1.3.2	Marche aléatoire classique continue (CTRW)	4
1.3.3	Marche aléatoire quantique discrète (DTQW)	4
1.3.4	Marche aléatoire quantique continue (CTQW)	5
1.4	Exemples de différentes marches	6
1.4.1	DTRW et DTQW	6
1.4.2	CTRW et CTQW	9
1.5	Un mot sur les simulations	10
1.6	Liens entre DTQW et CTQW	11
2	Les marches aléatoires quantiques aujourd’hui	13
2.1	État de l’art	13
2.2	Principe de l’expérience	14
2.3	Améliorations possibles du dispositif	16
3	Étude de l’algorithme de Grover	17
3.1	L’algorithme de Grover (DTQW)	17
3.2	Initialisation de la marche	19
3.3	Mise au point d’un algorithme de recherche	21
3.3.1	Dynamique de la marche	21
3.3.2	Détermination de γ_{opt}	23
3.3.3	Détermination de τ_{opt}	25
3.3.4	Comparaison en 2 et 3 dimensions	26
3.3.5	Limites de l’algorithme	26
3.4	Résultats	27
4	Conclusion	28
	Bibliographie	29

1 Introduction

La seconde révolution quantique et ses promesses sont aujourd'hui au cœur de nombreux débats scientifiques. En effet, la physique quantique rend envisageables, grâce à l'exploitation de phénomènes de superposition (et donc d'interférences), d'intrication, des calculs encore bien trop difficiles pour les ordinateurs classiques. Si le principal champ de recherche se tourne vers les opérations sur des qubits, une alternative se dégage 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. De nombreux algorithmes qui ont été développés avec l'avènement des ordinateurs utilisent des marches aléatoires, sur des graphes en général. L'apparition de dispositifs physiques permettant leur implémentation expérimentale rend légitime de se demander si on ne pourrait pas utiliser certaines propriétés des marches quantiques pour gagner en rapidité de calcul.

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), qui ressemblent beaucoup au cas classique, et les marches continues (CTQW: continuous-time quantum walk) où on laisse évoluer une particule sous l'effet d'un hamiltonien, qui réalise un couplage entre les différentes positions de l'espace. Le but de ce PSC est donc de dégager les avantages offerts par les marches quantiques et de voir s'il est possible de les utiliser pour améliorer des algorithmes classiques.

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. Or, il est possible de réaliser une marche quantique continue dans l'espace des impulsions d'une particule. Cela permettrait alors de créer une marche quantique avec un contrôle sur les transitions d'un site à son voisin en 3 dimensions, et non seulement au sein d'un plan ou d'un axe, ce qui n'a encore jamais été fait. En partant d'un condensat de Bose-Einstein constitué d'atomes d'Hélium, pouvant contenir jusqu'à environ 10^6 particules, il serait alors possible de reconstituer la distribution complète de la marche.

Ce PSC a donc pour objectif de répondre à la question suivante : est-ce intéressant de réaliser une telle marche ? Il conviendra donc, après avoir compris le fonctionnement de l'expérience, de se demander s'il existe des algorithmes intéressants qui pourraient tirer parti des particularités de la marche et de la troisième dimension qu'offre l'expérience, et si oui, comment les implémenter, et comment les simuler pour pouvoir les tester. Mais commençons tout d'abord par comprendre ce que sont les marches aléatoires quantiques !

1.2 Résultats obtenus

1.3 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.

1.3.1 Marche aléatoire classique discrète (DTRW)

On considère une marche aléatoire sur un ensemble fini de N sites. On représente la distribution de probabilité 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 :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \sum_{i=1}^N P(n)_i = 1$$

soit

$$\forall n \in \mathbb{N}, \|P(n)\|_1 = 1$$

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

$$\hat{U}P(n) = P(n+1)$$

C'est l'opérateur qui fait avancer la marche. Celui-ci peut dépendre de n , mais ce sera rarement le cas dans l'étude présente. Puisque le vecteur $P(n)$ doit rester normé, il vient que \hat{U} doit être unitaire pour $\|\cdot\|_1$.

Pour modéliser une marche aléatoire sur un graphe, on prendra la matrice d'adjacence de ce graphe, A , telle que $A_{i,j} = \mathbf{1}(i \text{ relié à } j)$ (en ajustant les poids des arêtes de telle sorte à obtenir un opérateur unitaire).

1.3.2 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 qu'avant, 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. Cela 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 :

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

avec $\text{deg}(i)$ le degré d'un sommet i .

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

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

avec $\hat{U}(t) = e^{-tL}$ l'opérateur d'évolution continue.

1.3.3 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 cette fois donnée par $\|\langle i|\psi_n\rangle\|^2$. Cette fois, la condition de normalisation est 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 $\|\cdot\|_2$ cette fois.

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. Les interférences introduites par la mécanique quantique (constructives comme destructives) donnent à ces marches des propriétés très intéressantes que nous développerons dans la suite.

1.3.4 Marche aléatoire quantique continue (CTQW)

De la même manière que dans le cas classique, on peut introduire des marches aléatoire 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 :

$$\frac{\partial}{\partial it} \psi = -\frac{H}{\hbar} \psi \quad (1)$$

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

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

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

avec $\hat{U} = e^{-\frac{it}{\hbar} H}$ l'opérateur d'évolution de la marche.

Les conditions sur le hamiltonien à utiliser pour la marche sur un graphe sont moins restrictives que pour le laplacien. En particulier, étant donné un laplacien L sur un graphe G , il existe de nombreux hamiltoniens correspondant à l'évolution décrite par L . Le passage de l'un à l'autre doit préserver la topologie du graphe, c'est-à-dire $L_{i,j} = 0 \leftrightarrow H_{i,j} = 0$. Les termes non-diagonaux du hamiltonien correspondent à des taux de transition en termes d'*amplitudes* de probabilité tandis que ceux du laplacien sont des taux de transition en termes de probabilités, ce qui implique la condition $L_{i,j} = -|H_{i,j}|^2$. La somme des coefficients du laplacien sur une ligne ou une colonne devant être nulle (condition nécessaire à l'unitarité de l'évolution), on a $L_{j,j} = \sum_{i \neq j} |H_{i,j}|^2$. On remarque ainsi que les termes diagonaux du hamiltonien n'ont pas d'importance dans l'équivalence classique-quantique entre un laplacien et un hamiltonien sur un graphe. Ceci permet une certaine liberté dans les hamiltoniens à considérer.

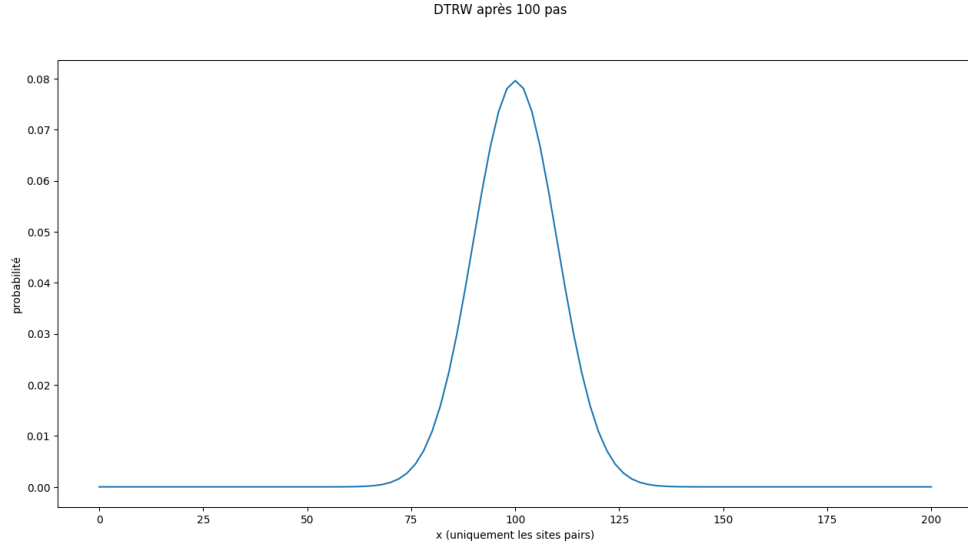
On constate deux choses grâce aux formalismes introduits. Tout d'abord, les marches discrètes et continues semblent, dans leur définition, assez semblables (notamment par l'opérateur d'évolution). On développera dans la suite les liens entre marches continues et discrètes. Ensuite, le formalisme entre marches classique et continues ne semble différer que par la métrique employée. 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.

1.4 Exemples de différentes marches

1.4.1 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 la 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 :



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, ici $x=100$.

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, qui selon s'il s'agit de $|+\rangle$ ou de $|-\rangle$ 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 : $|\psi\rangle = |x, \pm\rangle$. L'opérateur *shift* \hat{T} qui permet le déplacement de la particule est le suivant :

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

Par exemple,

$$\hat{T} |0, +\rangle = |0, +\rangle$$

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

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

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

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

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

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 réapplique l'opérateur \hat{T} , la partie de spin positif va avancer à nouveau, et la partie de spin négatif va reculer à 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 prend l'opérateur de Hadamard :

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

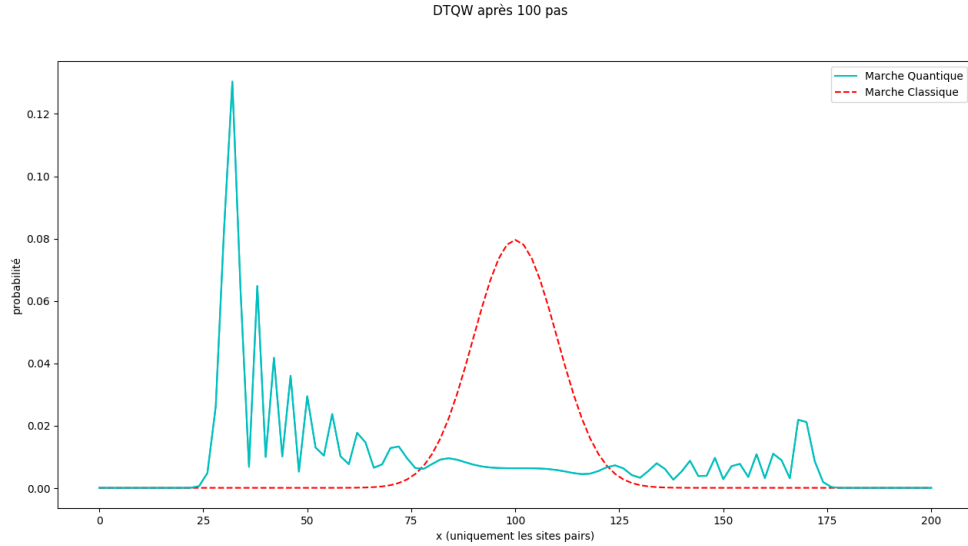
Ce *coin* sera donc appliqué à chaque étape avant le *shift*. On obtient ainsi l'opérateur d'évolution :

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

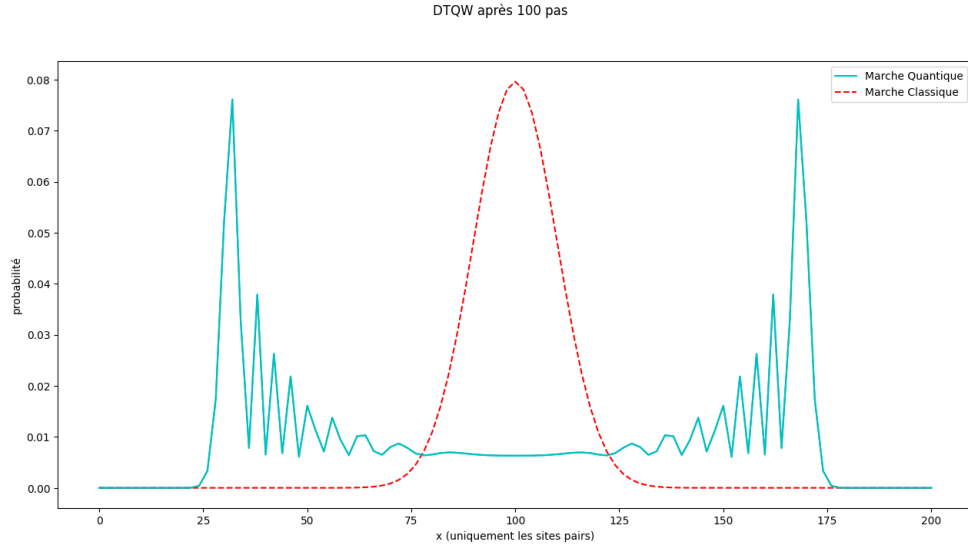
et la marche suit la dynamique suivante :

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

De cette manière, on obtient la marche souhaitée. En initialisant la marche par $|\psi_0\rangle = |0, +\rangle$ on obtient la distribution suivante :

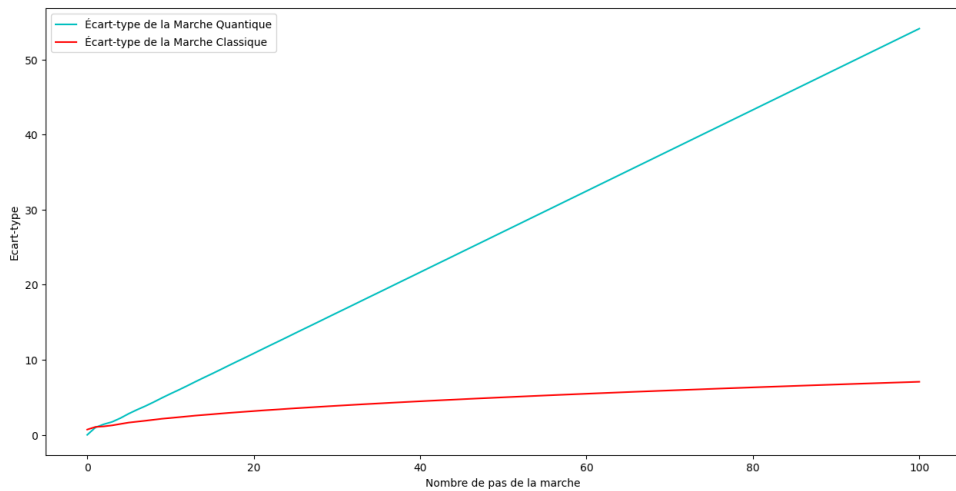


On remarque que certes la marche s'étale plus vite qu'une marche aléatoire classique, elle a toutefois le défaut de n'être pas centrée. On corrige ceci et choisissant un autre état initial pour la marche : $|\psi_0\rangle = |0\rangle \otimes (|+\rangle + i * |-\rangle)$ et on obtient :



La première chose que l'on remarque c'est la très importante différence entre marche classique et marche quantique autour du point de départ. Une explication de ce phénomène est que la marche classique fait, à chaque étape, demi-tour par rapport à son déplacement précédent avec une probabilité $\frac{1}{2}$. Toutefois, lors d'une marche quantique, des phénomènes d'interférence réduisent drastiquement ce phénomène. 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 $O(\sqrt{n})$. Cet étalement est particulièrement intéressant lorsqu'on souhaite explorer un espace, car la marche aléatoire présente une accélération quadratique par rapport à la marche classique.



On retrouvera cette accélération quadratique dans 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 $O(\sqrt{n})$.

1.4.2 CTRW et CTQW

Pour introduire 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 discrétiser 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 :

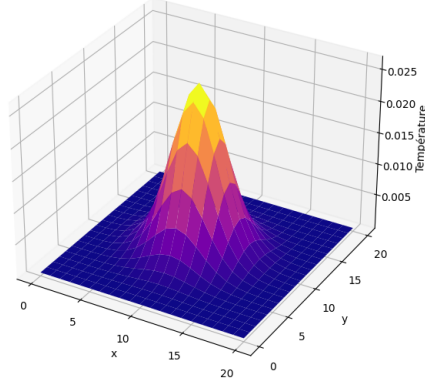
$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= LT \\ L_{i,j} &= \alpha(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1} - 2\delta_{i,j}) \end{aligned}$$

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 :

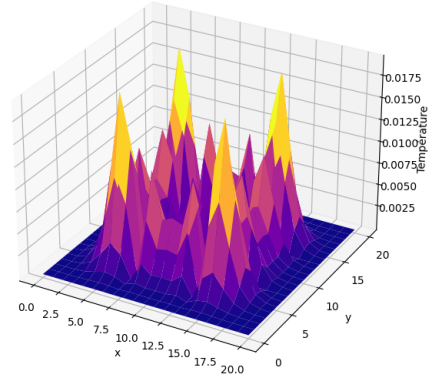
$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

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 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 :

... par une marche classique



... par une marche 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, 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.

Toutefois, 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.

1.5 Un mot sur les simulations

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 bibliothèques, 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, comme nous utilisons principalement des hamiltoniens et laplaciens indépendants du temps, nous connaissons donc les solutions explicites des marches. Nous avons 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 $\hat{U} = e^{-Ldt}$. La méthode renvoie alors la marche discrète qui correspond à l'opérateur \hat{U} .

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

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 (ou du laplacien de

la marche à un facteur \hbar près). Autrement dit, u correspond au temps caractéristique de la transition la plus rapide de l'hamiltonien.

1.6 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 à temps continu à une marche à temps discret ?

Commençons par étudier le cas à 1D, avec une marche sur la ligne constituée des sites $|m\rangle$ pour $m \in \mathbb{Z}$.

Les équations de la marche discrète sont alors :

$$\begin{aligned}\psi_+(m, \tau + 1) &= \cos(\theta)\psi_+(m - 1, \tau) - i \sin(\theta)\psi_-(m - 1, \tau) \\ \psi_-(m, \tau + 1) &= \cos(\theta)\psi_-(m + 1, \tau) - i \sin(\theta)\psi_+(m + 1, \tau)\end{aligned}$$

où $\psi_+(m, \tau)$ (resp. $\psi_-(m, \tau)$) désigne l'amplitude de probabilité de l'état $|+, m\rangle$ (resp. $|-, m\rangle$) 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 mentionnée dans l'article Quantum random walks do not need a coin toss consiste à encoder l'état interne (+ ou - dans la parité du site). Ainsi, le site $|+, m\rangle$ (de la marche discrète) correspond au site $|2m + 1\rangle$ (de la marche continue), tandis que le site $|-, m\rangle$ (discret) correspond lui au site $|2m\rangle$ (continu).

Soit \hat{H} le hamiltonien décrivant 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, que l'on peut prendre nulle, la seule conséquence étant une phase arbitraire), avec une phase alternant entre deux valeurs, θ_e et θ_o , en fonction de la parité du site de "départ". Le hamiltonien s'écrit donc :

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

Ce 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 :

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

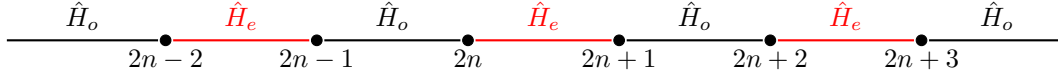


Fig. 1: Schéma de la discrétisation à 1D

On considère les deux opérateurs d'évolution U_e et U_o avec $U_i = e^{-i\frac{\hat{H}_i}{\hbar}T_i}$ pour un certain T_i dont le choix déterminera le paramètre θ quantifiant la marche discrète dans les équations que l'on cherche à obtenir. On peut alors calculer :

$$U_e = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\gamma T_e}{\hbar}) & -ie^{i\theta_e} \sin(\frac{\gamma T_e}{\hbar}) \\ -ie^{-i\theta_e} \sin(\frac{\gamma T_e}{\hbar}) & \cos(\frac{\gamma T_e}{\hbar}) \end{pmatrix}$$

$$U_o = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\gamma T_o}{\hbar}) & -ie^{i\theta_o} \sin(\frac{\gamma T_o}{\hbar}) \\ -ie^{-i\theta_o} \sin(\frac{\gamma T_o}{\hbar}) & \cos(\frac{\gamma T_o}{\hbar}) \end{pmatrix}$$

On choisit les paramètres $\theta_e = 0$, $\theta_o = \pi$, $T_e = \frac{\pi\hbar}{2\gamma}$, $T_o = \frac{\hbar}{\gamma}(\frac{\pi}{2} - \theta)$. On a alors :

$$U_e = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

$$U_o = \begin{pmatrix} \sin \theta & i \cos \theta \\ i \cos \theta & \sin \theta \end{pmatrix}$$

On a alors :

$$U_e U_o |2n+1\rangle = \cos \theta |2n+3\rangle - i \sin \theta |2n+2\rangle$$

$$U_e U_o |2n\rangle = \cos \theta |2n-2\rangle - i \sin \theta |2n-1\rangle$$

On considère la marche à temps discret définie par : $|\Psi(\tau)\rangle = [U_e U_o]^\tau |\Psi(0)\rangle$ 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 :

$$\psi_+(n, \tau+1) = \cos(\theta) \psi_+(n+1, \tau) - i \sin(\theta) \psi_-(n+1, \tau)$$

$$\psi_-(n, \tau+1) = \cos(\theta) \psi_-(n-1, \tau) - i \sin(\theta) \psi_+(n-1, \tau)$$

On a ainsi retrouvé une marche aléatoire discrète par l'application de hamiltoniens sur de durées bien choisies.

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 une direction possible 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 le 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 utiliser des sites regroupant 8 sous-sites, 6 d'entre eux servant à déterminer la direction du déplacement.

cf. articles Connecting the discrete- and continuous-time quantum walks
and Quantum random walks do not need a coin toss

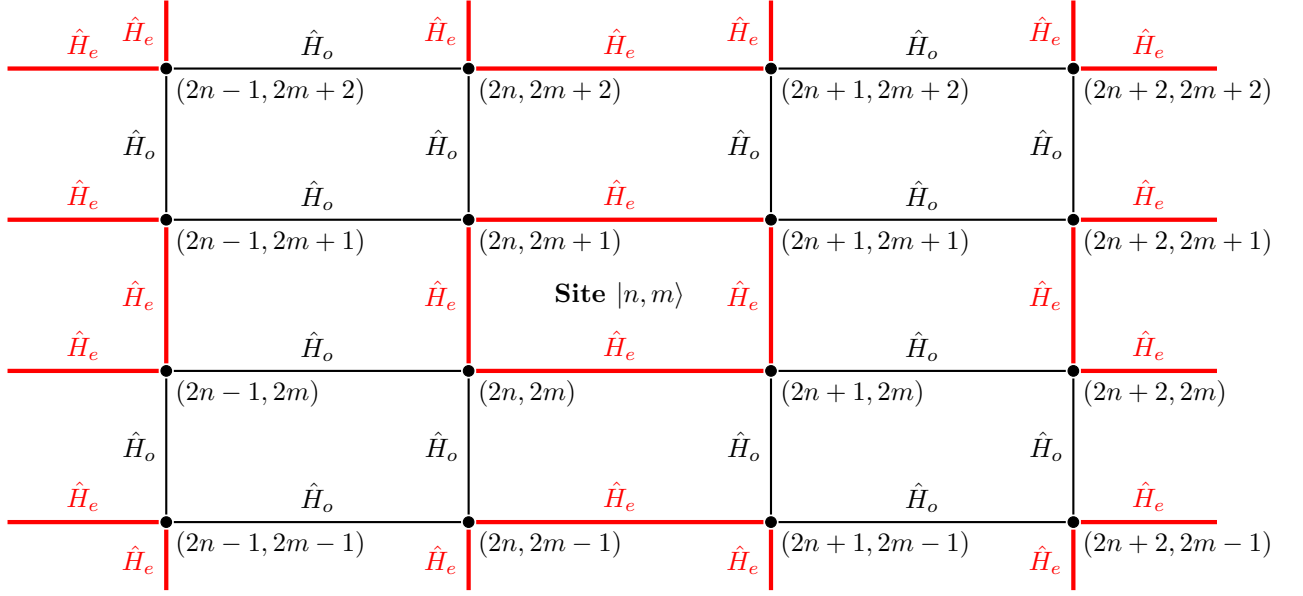


Fig. 2: Schéma de la discrétisation à 2D

2 Les marches aléatoires quantiques aujourd'hui

2.1 État de l'art

Pour pouvoir évaluer l'intérêt de la méthode d'implémentation de marches aléatoires quantiques que l'on se propose d'étudier, il est important de s'intéresser aux performances d'autres méthodes de simulation. Cette comparaison peut se baser sur différents aspects de la marche aléatoire : nombre d'étapes réalisables par la marche, variété des structures de graphes qu'il est possible de simuler (avec différents critères tels que le nombre de sites, le nombre d'arêtes maximal par site, la possibilité de modifier les probabilités de transition d'un site à l'autre, ...), et enfin la qualité de la dispersion de la marche aléatoire. On peut retrouver dans la littérature deux types de méthodes : celles utilisant la manipulation d'atomes, et celles utilisant des photons.

Des marches aléatoires quantiques à l'aide de condensats d'atomes froids ont déjà été réalisées précédemment. La principale 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 (correspondants 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 balistique. 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 utilisant 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 de jusqu'à 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.

Cependant, 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 se tournent vers 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 utilisée pour encoder le "coin-state" ici. 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 tridimensionnelle. Cependant, le nombre d'étapes est très fortement limité (seulement 3 étapes réalisées) du fait des pertes optiques importantes aux niveaux 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 $37 \times 37 = 1369$ nœuds 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 (aux 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. L'expérience que l'on se propose de réaliser permet peut-être de corriger certains de ces défauts.


2.2 Principe de l'expérience

Une fois étudiées les approches alternatives ayant déjà été présentées dans la littérature, il est temps de s'intéresser au principe de fonctionnement de l'expérience que l'on souhaite étudier, basé sur l'article GADWAY 2015. Nous ne décrirons en détail que le fonctionnement à 1D (les dimensions supplémentaires donnant lieu à des calculs trop indigestes sans apporter de nouveaux concepts).

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, un fondamental noté $|g\rangle$ (d'énergie définie nulle par souci de simplicité) et un état excité noté $|e\rangle$ d'énergie $\hbar\omega_{eg}$ (ce qui est une approximation valide sous réserve d'un bon choix du désaccord

et de la polarisation de la lumière). 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 :

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

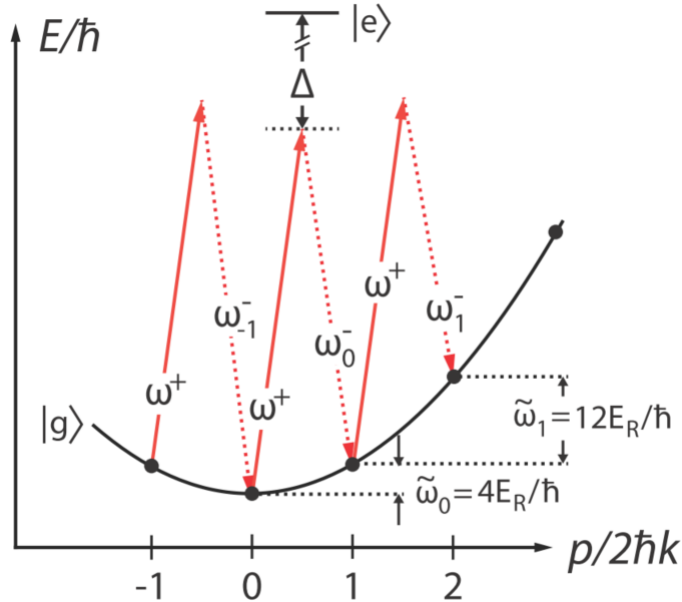


$$\bar{E}^+ \cos(kx - \omega^+ t + \phi^+) \quad \sum_n \bar{E}_n^- \cos(kx - \omega_n^- t + \phi_n^-)$$

On considère un champ électrique constitué d'une composante \mathbf{E}^+ se propageant selon l'axe $+x$ 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 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}_n^- . 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.



Ce dispositif peut être étendu aux dimensions supérieures, par exemple à 2D en rajoutant une nouvelle paire de lasers se propageant selon une direction faisant un angle θ avec la direction de la première paire de lasers. Un site est alors décrit par une paire de deux entiers. 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 $\theta \neq 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$, 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 le 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 rajoutant 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 $|n, m, l\rangle$ correspondent 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 $\mathbf{k}_3 = k(\cos\theta\cos\alpha\mathbf{x} + \sin\theta\cos\alpha\mathbf{y} + \sin\alpha\mathbf{z})$. 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 , 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 contrôlée par des paires différentes de lasers.

On obtient finalement le hamiltonien d'interaction à 3D:

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

On s'est ici limité aux transitions entre plus proches voisins. Cependant, on pourrait rajouter des transitions individuellement contrôlables entre n'importe quelle paire de sites.

2.3 Améliorations possibles du dispositif

Une amélioration possible du dispositif consiste à obtenir un contrôle des énergies des sites du hamiltonien d'interaction. La démarche pour réaliser cela est présentée dans (insérer ref Topological Anderson Insulator in Disordered Atomic Wires) et consiste à regrouper les sites d'impulsion par paires. L'intensité du couplage intra-paire correspond à l'énergie du site dans le hamiltonien effectif et le couplage inter-paires correspond au terme de couplage entre les deux sites.

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. La manière la plus simple d'implémenter un tel opérateur est simplement de modifier l'énergie du site marqué.

3 Étude de l'algorithme de Grover

3.1 L'algorithme de Grover (DTQW)

Une application prometteuse des marches aléatoires quantiques est la recherche d'un sommet dans un graphe. L'algorithme le plus connu qui permette de réaliser cette tâche est l'algorithme de Grover. 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 complexité rappelle déjà les propriétés du premier exemple.

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 la liste. C'est une idée 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 $\frac{\pi}{4}\sqrt{N}$ 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 d'ailleurs 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 ce que fait l'algorithme de Grover, c'est de faire 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} , lui, réalise une symétrie par rapport à $|\psi_0\rangle = |\psi(\theta_0)\rangle$, on en déduit que :

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

Ainsi,

$$\begin{aligned}\hat{H} |\psi(\theta)\rangle &= |\psi(\theta + 2 * \theta_0)\rangle \\ \hat{H}^n |\psi(\theta_0)\rangle &= |\psi((2n + 1)\theta_0)\rangle\end{aligned} \quad (3)$$

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'étape n_{opt} tel que $|\psi_{n_{opt}}\rangle = |w\rangle$, on résoud donc :

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

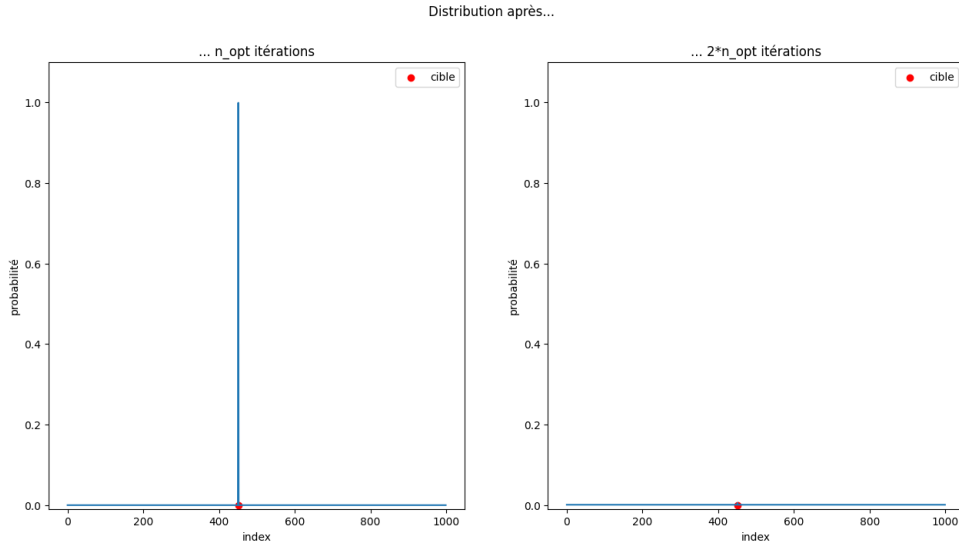
soit

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

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.



3.2 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, il est indispensable que la marche soit uniformément répartie sur le réseau au départ. Or, dans l'expérience que nous étudions, la particule est au départ localisée sur un unique site.

Toutefois, nous avons la possibilité 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.

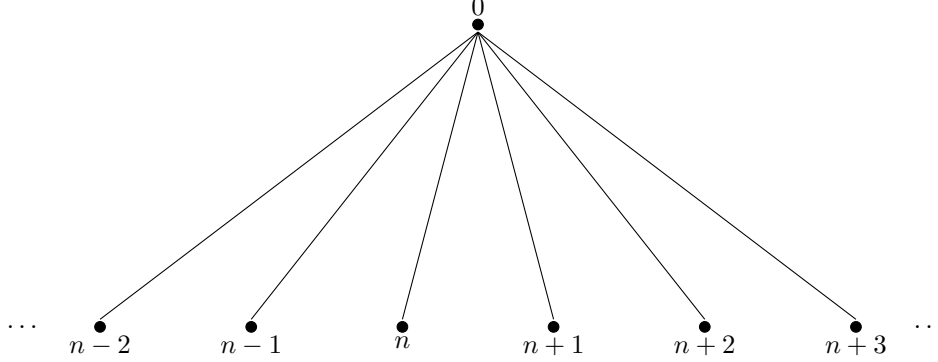


Fig. 3: Graphe utilisé pour l'initialisation sur tous les sommets

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

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

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

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 :

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

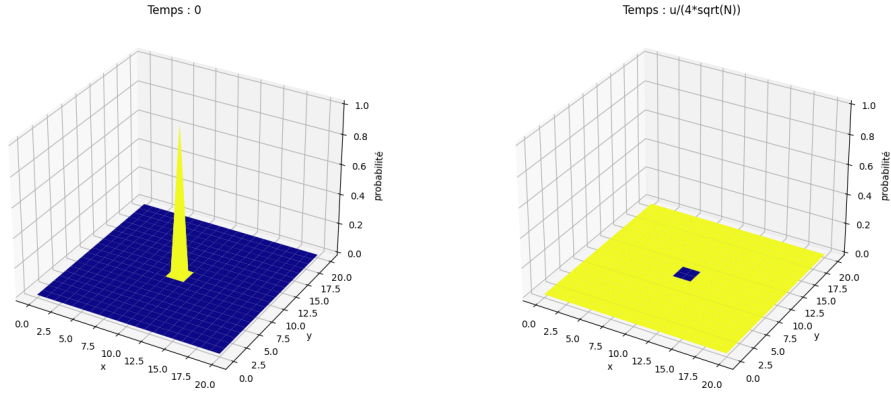
$$i \frac{\partial \alpha_0(t)}{\partial t} = \Omega * \sum_{j=1}^N \alpha_j(t)$$

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 :

Initialisation de la particule

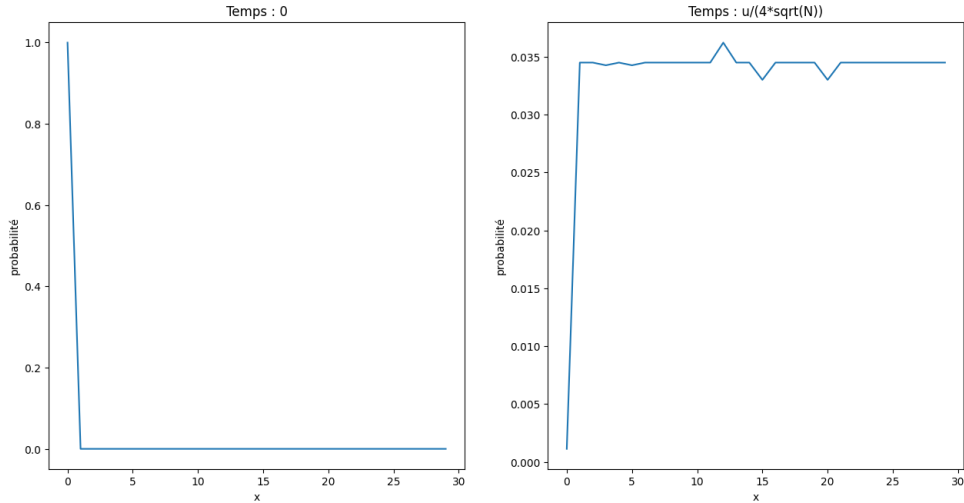


On se rappelle toutefois que tous les couplages ne sont pas autorisés dans le cadre de l'expérience. En effet, le couplage entre deux sites est défini par la différence d'énergie entre ces sites. On se rappelle que le site n possède une énergie $4n^2 * E_r$, et que donc la différence entre deux sites voisins 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 $2n+1 \neq 2m+1$.

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 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.

Initialisation de la particule



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 cela n'aura pas d'influence sur la marche.

3.3 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 de côté N . Après l'initialisation de la particule, à répartir uniformément sur le réseau, on définit 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).

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 :

$$H(\gamma) = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

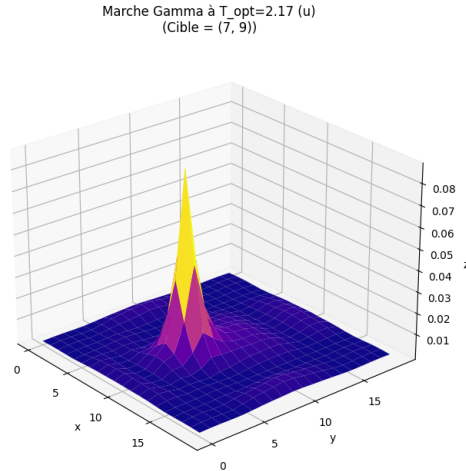
avec en bleu le terme diagonal correspondant au site ciblé (ici le site n°4).

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 côté N du réseau cubique et de la dimension (1,2 ou 3) du cube.

3.3.1 Dynamique de la marche

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

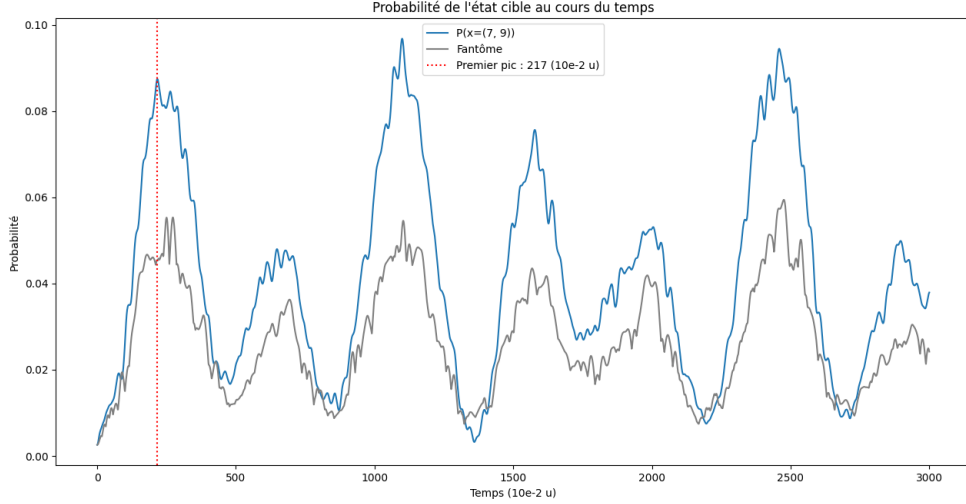
On se place en deux dimensions et on considère l'hamiltonien $H(\gamma = 1.4)$, ce qui, nous le verrons, est proche de γ_{opt} pour un réseau à deux dimensions. Au temps τ_{opt} , on obtient la distribution suivante :



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 $N^2 = 400$ sites différents, soit une probabilité moyenne de $\frac{1}{400} = 0.0025 \ll 0.1$).

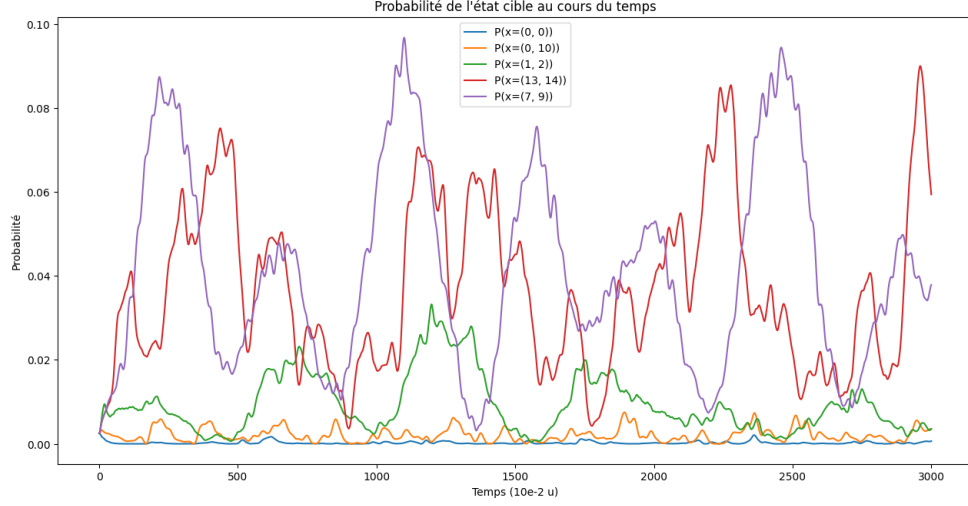
On peut aussi suivre la probabilité du site cible au cours du temps. Il faut toutefois en même temps vérifier qu'il n'y a pas de site *fantôme*, à savoir un site qui n'est pas la cible mais qui a tout de même une forte probabilité d'être détecté. Sur le graphe suivant, le *fantôme* correspond à la plus grande amplitude de probabilité qui n'est pas la cible.



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 influencer 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.



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 accessible sur le réseau, on considèrera dans la suite que les sites cibles ne sont pas trop près du bord.

3.3.2 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 :

$$\gamma_{opt} = \gamma_{opt}(d, N, w) \quad (5)$$

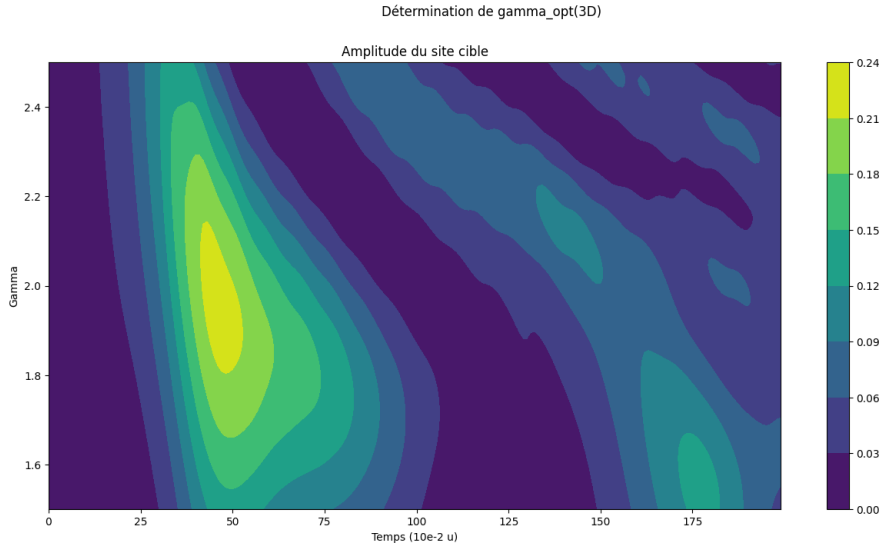
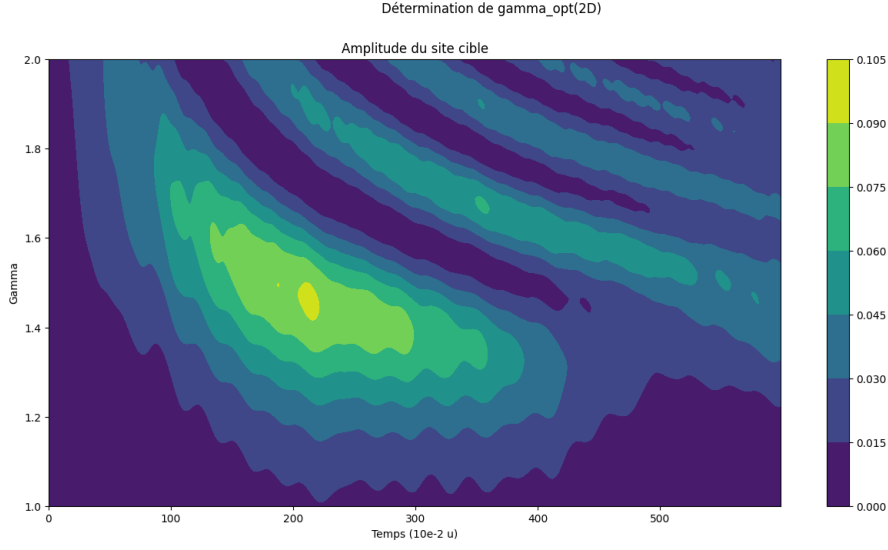
Comme expliqué plus haut, on considère que le site cible $|w\rangle$ n'est pas trop proche du bord du réseau. Sa position n'a donc que peu d'influence sur la marche, et donc on peut considérer que γ_{opt} est indépendant de w . Ceci est d'ailleurs indispensable, car γ_{opt} doit être optimal pour tout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

De plus, la dimension d ne peut prendre que 3 valeurs, puisque l'expérience que nous étudions ne sait pas simuler de marches à plus de trois dimensions. Accessoirement, il apparaît que notre algorithme ne fonctionne pas pour un réseau à une dimension. Ainsi, il nous suffit de déterminer :

$$\gamma_{opt,2d} = \gamma_{opt,2d}(N)$$

$$\gamma_{opt,3d} = \gamma_{opt,3d}(N)$$

Commençons par voir ce qu'il se passe à N fixé, en 2 et 3 dimensions, avec à chaque fois environ 400 sites au total.

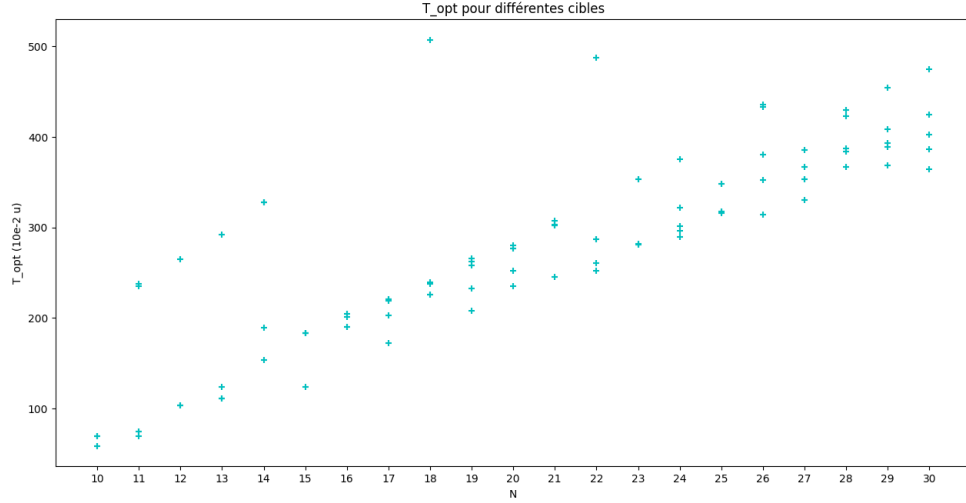


Ces graphes nous donnent une première idée de l'ordre de grandeur de ce coefficient γ_{opt} et 2 et 3 dimension. Toutefois, il convient de tester la marches pour plusieurs N et plusieurs cibles. On commence en 2 dimensions et on trace γ_{opt} en fonction de N , en espérant pouvoir en déduire l'expression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

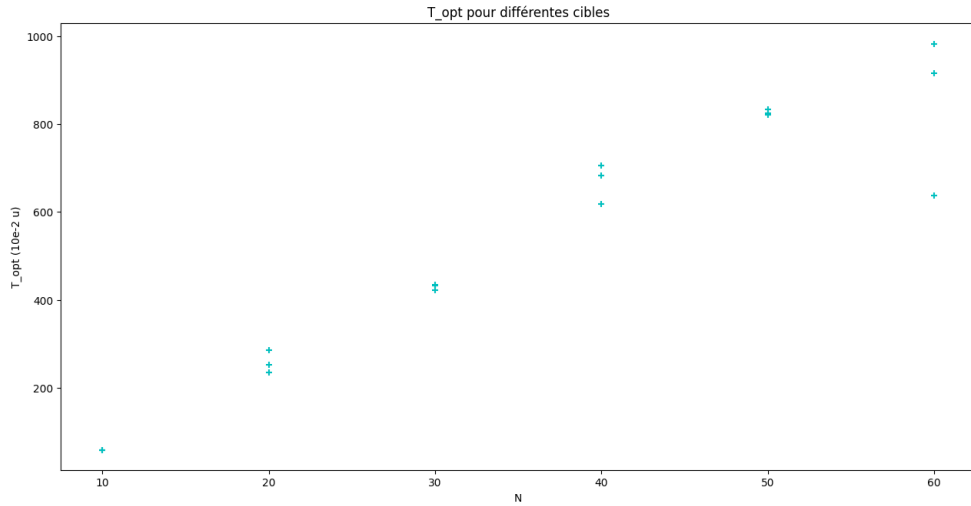
Ce dont on se rend compte, c'est qu'en réalité γ_{opt} ne dépend pas de la taille du réseau. On pouvait le soupçonner avant de faire tourner la simulation. L'impact du coefficient γ sur la marche est très *local*, puisqu'il n'implique que le site cible et ses voisins. γ a bien une forte influence sur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

3.3.3 Détermination de τ_{opt}

Maintenant que γ_{opt} est connu, il s'agit de déterminer τ_{opt} . De même qu'avant, on le détermine de manière expérimentale.



ou encore pour des N plus grands :



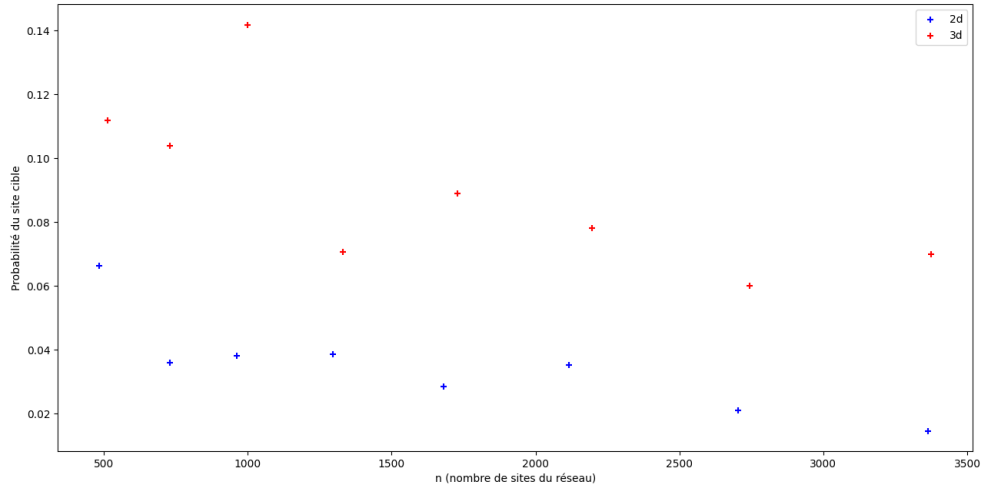
On comprend ainsi que τ_{opt} est linéaire en N , qui, rappelons-le, est la taille du côté du réseau cubique. Ainsi, pour un réseau en 3 dimensions, on trouve un élément parmi N^3 en $O(N)$, soit une complexité en $O(\sqrt[3]{n})$ avec $n = N^3$ le nombre de sites du réseau.

Lorsqu'on observe les simulations, on arrive à comprendre de quoi dépend τ_{opt} . Lorsqu'une marche aléatoire continue sur un réseau est lancée, les effets au bord font qu'une masse de probabilité se propage vers le centre du réseau. Le moment où cette masse de probabilité atteint le site cible

correspond à τ_{opt} . C'est pourquoi τ_{opt} est linéaire en la taille du réseau, puisqu'il dépend de la distance du site cible au bord.

$$\begin{aligned}\gamma_{opt,2d} &= 1.4 \\ \gamma_{opt,3d} &= 2.0 \\ \tau_{opt,2d}(N) &= (0.16N)u \\ \tau_{opt,3d}(N) &= (0.08N)u\end{aligned}$$

3.3.4 Comparaison en 2 et 3 dimensions



On constate que la marche en trois dimensions est bien plus efficace, et ce pour deux raisons. Tout d'abord, $\tau_{opt,3d} < \tau_{opt,2d}$, ce qu'on peut expliquer par une remarque précédente. τ_{opt} est lié à la distance au bord du cube, et pour un réseau à n sites, cette distance est $\sqrt[3]{n}$ pour un réseau 3D, et \sqrt{n} pour un réseau 2D. Ceci explique pourquoi la marche 3D est plus rapide.

Ensuite, la probabilité de succès est aussi meilleure pour la marche 3D, comme on peut le voir sur le graphique précédent. On peut supposer que c'est simplement dû au fait que le site cible possède 6 voisins, et non seulement 4 pour un réseau 2D.

Nous n'avons pas présenté ici de résultats pour des réseaux à une dimension, simplement parce que cela ne marche pas.

3.3.5 Limites de l'algorithme

Il s'agit ici de nuancer les résultats précédents. Premièrement, les simulations ne permettent que difficilement de dépasser 5000 sites sur le réseau (qu'il soit en 2 ou 3 dimensions). En effet, pour $n = 5000$ sites, l'hamiltonien de l'expérience contient 25 millions de coefficients, et il est nécessaire de calculer l'exponentielle de cet hamiltonien. Or, pour une étude asymptotique, $n = 5000$ reste un nombre très faible.

De plus, le comportement de nos paramètres optimaux réels est d'autant plus proche de nos paramètres optimaux estimés que N est grand, puisque les perturbations liées à la distance au bord diminue. Il est donc dommage pour nos estimations qu'on ne puisse pas simuler de taille de réseau plus grande.

Ensuite, une deuxième limite vient de la façon dont on extrait le résultat de l'expérience. Dans l'expérience, on considère jusqu'ici qu'on peut connaître la fonction d'onde de la particule en mesurant des millions de particules. Mais si $n = 10^9$ par exemple, la probabilité du site cible sera certes largement supérieure aux probabilités des autres sites, mais sera sans doute au plus de l'ordre de 10^{-6} , et il n'est pas certain que la mesure de millions de particules permettent de discerner un site plus probable que les autres.

Pour compenser, il faudrait augmenter le nombre de particules dans l'expérience. En algorithmique classique, cette contrainte pourrait être équivalente à une complexité spatiale de l'algorithme.

3.4 Résultats

4 Conclusion

Bibliographie

- [Asp+] Alain ASPECT et al. *Quantum Optics 1 - Lasers*. Département de Physique, École Polytechnique.
- [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.
- [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>.
- [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>.
- [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>.