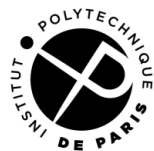


ÉCOLE NATIONALE DES  
**PONTS**  
ET **CHAUSSÉES**



**IP PARIS**

PROJET DE PREMIÈRE ANNÉE 2025

RAPPORT FINAL

---

# Informatique Quantique

---

Réalisé par :

**Youssef Sahraoui**

**Pierre Bressollette**

Supervisé par :

**Henri Pinsolle**

**Alicia Negre**

# Contents

<b>1</b>	<b>Postulats de la Mécanique Quantique</b>	<b>2</b>
1.1	Postulat d'espace d'état :	2
1.2	Postulat de Mesure	2
1.3	Postulat d'évolution temporelle d'un système quantique	3
1.4	Postulat d'opérateur quantique	3
1.5	Exemples	3
1.5.1	Système à <i>1-qubit</i>	3
1.5.2	Système à <i>n-qubits</i>	5
<b>2</b>	<b>De la NISQ au FT</b>	<b>7</b>
<b>3</b>	<b>Application aux EDP : <i>cas de l'équation de diffusion-advection</i></b>	<b>8</b>
3.1	Généralités	8
3.2	Discrétisation de l'équation de diffusion	8
3.3	Encodage de $\hat{A}$ via simulation hamiltonienne	10
3.4	Algorithme de combinaison linéaire d'unitaires (LCU)	11
3.5	Implémentation du circuit en 1D	11
3.5.1	Implémentation des Portes Quantiques	11
3.5.2	Schéma du circuit quantique	12
3.6	Analyse de Performance	13
3.7	Simulation Python	13
<b>4</b>	<b>Conclusion</b>	<b>14</b>

# 1 Postulats de la Mécanique Quantique

## Remarque

Avant même de commencer, il est important de noter que ces postulats sont adaptés dans leur formulation au formalisme utilisé en informatique quantique.

### 1.1 Postulat d'espace d'état :

À chaque système quantique est associé un espace de Hilbert  $(\mathcal{H}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$  hermitien et séparable, où  $\mathcal{H}$  est appelé l'espace des états, dans le cadre de l'informatique quantique  $\mathcal{H}$  est considéré de dimension finie.

→ L'état physique d'un système est défini par un vecteur  $\psi$ , noté par un ket  $|\psi\rangle$ .

- $\|\psi\|_{\mathcal{H}} = \langle \psi | \psi \rangle = 1$  (état normalisé)
- $\forall \theta \in \mathbb{R}$ ,  $e^{i\theta} |\psi\rangle$  et  $|\psi\rangle$  représentent le même état

### Principe de superposition

Comme  $\mathcal{H}$  est un  $\mathbb{C}$ -ev, la combinaison linéaire complexe d'états acceptables est aussi physiquement acceptable (à normalisation près).

### Quelques définitions utiles

Pour  $\psi \in \mathcal{H}$  :

- La transposée complexe est notée avec un dagger :  $\psi^\dagger$ .
- On introduit une nouvelle notation appelée bra, où  $\langle \psi | \in \mathcal{H}^*$  (l'espace dual de  $\mathcal{H}$ ), qui est une forme linéaire agissant comme  $\psi^\dagger$ , cohérente à l'aide théorème de représentation de Riesz.
- Comme  $\mathcal{H}$  est séparable, on prend une base orthonormée  $(|\psi_i\rangle)_{i \in \mathcal{I}}$  de  $\mathcal{H}$ .

$$|\psi\rangle = \sum_{i \in \mathcal{I}} a_i |\psi_i\rangle \quad ; \quad \langle \psi | = \sum_{i \in \mathcal{I}} a_i^* \langle \psi_i |$$

- L'avantage de la notation bra-ket réside dans le fait qu'elle simplifie les produits scalaires. Pour  $\psi, \phi \in \mathcal{H}$  tels que :

$$|\psi\rangle = \sum_{i \in \mathcal{I}} a_i |\psi_i\rangle \quad \text{et} \quad |\phi\rangle = \sum_{i \in \mathcal{I}} b_i |\psi_i\rangle,$$

On obtient :

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle &= \left\langle \sum_{i \in \mathcal{I}} a_i \psi_i \middle| \sum_{i \in \mathcal{I}} b_i \psi_i \right\rangle = \left( \sum_{i \in \mathcal{I}} a_i^* \langle \psi_i | \right) \left( \sum_{i \in \mathcal{I}} b_i |\psi_i\rangle \right) \\ &= \sum_{i, j \in \mathcal{I}} a_i^* b_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \sum_{i, j \in \mathcal{I}} a_i^* b_j \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \sum_{i \in \mathcal{I}} a_i^* b_i. \end{aligned}$$

### 1.2 Postulat de Mesure

À toute grandeur physique  $A$  associée au système quantique considéré, correspond un opérateur auto-adjoint sur  $\mathcal{H}$ , généralement noté  $\hat{A}$ , et appelé l'observable  $A$ . Ainsi, si l'on mesure la grandeur  $A$ , on obtient les résultats suivants :

- Le résultat de la mesure est un élément du spectre  $\sigma(\hat{A})$ , avec  $\sigma(\hat{A}) \subset \mathbb{R}$  (théorème spectral).

*N.B : Le spectre ponctuel  $\sigma_p(\hat{A})$  est inclus dans  $\sigma(\hat{A})$ , ce qui constitue une notion plus générale, notamment en dimension infinie.*

En supposant que le spectre soit dénombrable  $\sigma(\hat{A}) = (\lambda_n)_{n \in \mathbb{N}}$

→ La probabilité de mesurer la valeur  $a \in \sigma(\hat{A})$ , sachant que juste avant la mesure l'état du système était  $\psi$ , est donnée par :

$$p(a) = \mathbb{E}_\psi(1_{\{a\}}(\hat{A})) = \langle \psi | 1_{\{a\}}(\hat{A}) | \psi \rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}} 1_{\{a\}}(\lambda_n) | \langle \psi | \psi_n \rangle |^2.$$

Le nouveau état du système est :

$$|\psi^+\rangle = \frac{1}{\|1_{\{a\}}(\hat{A})\psi\|_{\mathcal{H}}} 1_{\{a\}}(\hat{A}) |\psi\rangle$$

Ici,  $\psi_n$  est associé à la valeur du spectre  $\lambda_n$ .

### 1.3 Postulat d'évolution temporelle d'un système quantique

L'évolution de l'état  $\psi$  d'un système quantique isolé est régie par l'équation de Schrödinger. Elle fait intervenir l'opérateur  $\hat{H}$ , associé à l'observable hamiltonien  $H$  de l'énergie.

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

La solution de cette équation est donnée par un opérateur Unitaire  $U$ , i.e ;  $U^\dagger U = I$  où  $I \equiv I_{\mathcal{H}}$  :

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle = U(t) |\psi_0\rangle, & t \in \mathbb{R} \\ |\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle \end{cases}$$

Dans le cas simple où l'Hamiltonien  $\hat{H}$  ne dépend pas du temps  $t$  :

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

### 1.4 Postulat d'opérateur quantique

Dans le cas général, l'évolution d'un état quantique  $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$  est toujours réalisée par l'action d'un opérateur unitaire  $U$  c'est-à-dire :

$$|\psi'\rangle = U |\psi\rangle, \quad U^\dagger U = I.$$

Dans le contexte de l'informatique quantique, un opérateur unitaire est souvent appelé une *porte quantique* - *Gate*.

### Représentation Graphique :

$$|\psi\rangle \text{ --- } \boxed{U} \text{ --- } |\psi'\rangle$$

## 1.5 Exemples

### 1.5.1 Système à 1-qubit

Un *qubit*, comme l'indique son nom, fait référence à un bit quantique, qui est une généralisation des bits classiques  $\{0,1\}$  et qui peut être dans une superposition de ces deux états.

- L'espace d'état de ce système est de dimension 2, d'où  $\mathcal{H} \cong \mathbb{C}^2$ .
- Une base de  $\mathcal{H}$  sera  $(|0\rangle, |1\rangle)$ .

En vue de l'isomorphie, on considérera  $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  et  $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

## Remarque utile

Pour connaître l'action d'une porte quantique, il suffit donc de déterminer l'image de ces 2 vecteurs de base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ .

## Représentation dans la Sphère de Bloch

L'état d'un *qubit*  $|\psi\rangle$  peut être exprimé comme suit, en utilisant les coordonnées sphériques  $\theta$  et  $\phi$  sur la sphère de Bloch. Notons que, selon le premier postulat de la mécanique quantique, un déphasage global ne modifie pas l'état physique. Par conséquent, on peut ramener tout le déphasage sur un seul côté de la superposition :

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

avec  $|a|^2 + |b|^2 = 1$  (la condition de normalisation).

En utilisant cette simplification, l'état  $|\psi\rangle$  peut être réécrit sous la forme suivante, où les coefficients  $a$  et  $b$  sont exprimés en termes des coordonnées sphériques :

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle$$

Ici,  $\theta$  et  $\phi$  sont les coordonnées sphériques qui paramètrent l'état sur la sphère de Bloch :

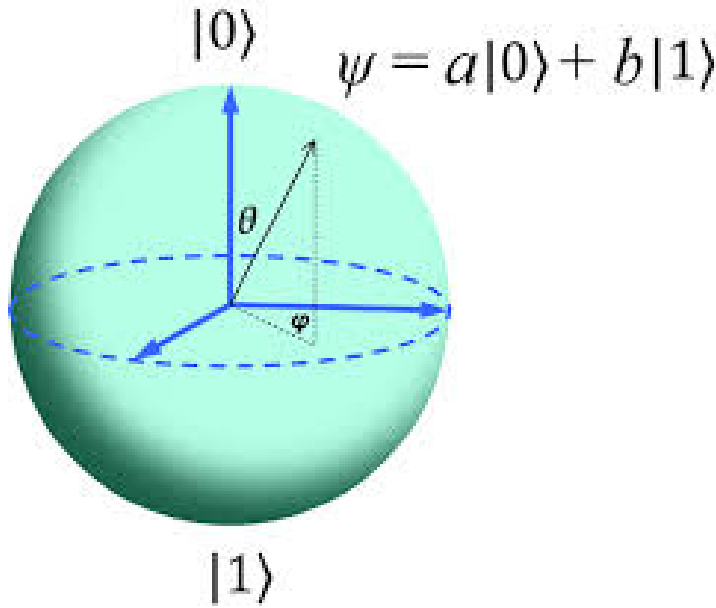


Figure 1: Sphère de Bloch représentant un état  $|\psi\rangle$  sur  $\mathbb{S}^2$

Ainsi, chaque état quantique  $|\psi\rangle$  correspond à un point sur la sphère de Bloch, et le difféomorphisme entre l'espace d'états normalisés et la sphère  $\mathbb{S}^2$  est donné par les coordonnées  $\theta$  et  $\phi$ , qui représentent respectivement l'angle polaire et l'angle azimutal de ce point sur la sphère.

## Action des opérateurs et portes quantiques

Les observables agissant sur nos états dans l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}$ , isomorphe à  $\mathcal{I}$  (espace des matrices hermitiennes de  $\mathbb{C}^{2 \times 2}$ ), peuvent être interprétés comme des portes quantiques qui modifient l'état d'un qubit. Ces opérateurs sont représentés par les matrices de Pauli, qui forment une base naturelle de  $\mathcal{I}$ , comme suit :

$$\mathcal{I} = \text{Vect}_{\mathbb{R}}(I_2, \sigma_X, \sigma_Y, \sigma_Z) \quad (\text{espace des matrices hermitiennes de } \mathbb{C}^{2 \times 2})$$

où  $I_2$  est la matrice identité  $2 \times 2$ , et  $\sigma_X$ ,  $\sigma_Y$ , et  $\sigma_Z$  sont les matrices de Pauli :

$$\sigma_X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

### Porte NOT (ou $\sigma_X$ )

La matrice  $\sigma_X$ , appelée également la porte NOT. Plus précisément, elle échange les états  $|0\rangle$  et  $|1\rangle$ . La porte  $\sigma_X$  effectue une opération de **flip** sur le qubit, ce qui peut être vu comme un échange entre les états de base :

$$\sigma_X |0\rangle = |1\rangle, \quad \sigma_X |1\rangle = |0\rangle.$$

### Porte de Hadamard

La porte de Hadamard, souvent notée  $H$ , est une porte qui applique une superposition. Elle est représentée par la matrice suivante :

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Cette porte transforme les états de base  $|0\rangle$  et  $|1\rangle$  de la manière suivante :

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

Ainsi, la porte de Hadamard crée une superposition équivalente entre les états  $|0\rangle$  et  $|1\rangle$ , ce qui est utile pour créer des intrications.

### Porte de Rotation selon l'axe Oz

La porte de rotation  $R_z(\theta)$  correspond à une rotation de l'état d'un qubit sur la sphère de Bloch. Elle est représentée par la matrice suivante :

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix}.$$

Plus précisément :

$$R_z(\theta) |0\rangle = e^{-i\frac{\theta}{2}} |0\rangle, \quad R_z(\theta) |1\rangle = e^{i\frac{\theta}{2}} |1\rangle.$$

Cela correspond à une rotation sur l'axe  $z$  de la sphère de Bloch. Les portes de rotation sont très utiles pour appliquer des déphasages dans des circuits quantiques, comme dans les circuits de mesure.

### 1.5.2 Système à $n$ -qubits

Notant  $N = 2^n$

### Tensorisation

Lorsqu'un état quantique est composé de  $n$ -qubits, chacun ayant un espace d'état  $\mathcal{H}_i \cong \mathbb{C}^2$  avec  $i = 0, 1, \dots, n-1$ , l'espace d'état total est donné par le produit tensoriel de ces espaces d'état. Cet espace est noté :

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{i=0}^{n-1} \mathcal{H}_i$$

Si  $|\psi_i\rangle$  est un vecteur d'état dans l'espace  $\mathcal{H}_i$ , alors l'état global du système est donné par :

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle \otimes |\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{n-1}\rangle$$

L'espace d'états à  $n$ -qubits  $\mathcal{H} \cong (\mathbb{C}^2)^{\otimes n} \cong \mathbb{C}^N$

On pourra donc adopter la notation suivante :

Pour  $j \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ , on écrit la décomposition en base 2 du nombre  $j$  sous la forme :

$$j = (j_{n-1}, \dots, j_0)^{(2)}$$

où  $j_k \in \{0, 1\}$  pour chaque  $k \in \{0, 1, \dots, n-1\}$  est le  $k$ -ième chiffre binaire de  $j$  dans sa représentation binaire.

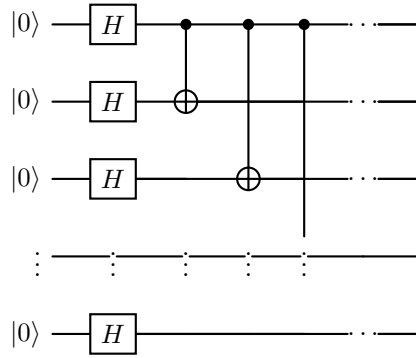
Ainsi, l'état quantique  $|j\rangle$ , correspondant à la valeur binaire de  $j$ , est donné par :

$$|j\rangle = |j_{n-1}\rangle \otimes |j_{n-2}\rangle \otimes \dots \otimes |j_1\rangle \otimes |j_0\rangle$$

On écrira tout simplement l'état  $\psi$  :

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \alpha_j |j\rangle$$

### Exemple : Schéma d'un circuit à $n$ -qubits



### Action des opérateurs sur $n$ -qubits

Les opérateurs agissant sur notre nouvel espace  $\mathcal{H}$  sont souvent obtenus par tensorisation d'opérateurs définis pour un seul qubit. Toutefois, les cas les plus intéressants concernent la manipulation des états intriqués, en faisant agir sur ces états des matrices de  $\mathbb{C}^{N \times N}$ .

### Exemple pratique

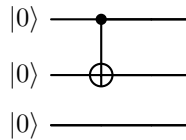
Soit un opérateur  $U$  agissant sur un seul qubit, sa version étendue à un système de  $n$  qubits est donnée par le produit tensoriel

$$U^{(i)} = I \otimes I \otimes \dots \otimes U \otimes \dots \otimes I$$

où  $U$  agit sur le  $i$ -ième qubit et  $I$  est l'opérateur identité de dimension  $2 \times 2$ .

Pour un système à trois qubits, si on veut que CNOT agisse sur les deux premiers qubits, on l'étend par tensorisation :

$$\text{CNOT} \otimes I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$



Finalement, pour trouver l'état final on agit :  $\text{CNOT} \otimes I$  à  $|000\rangle$

$$|\psi_{\text{finale}}\rangle = \text{CNOT} \otimes I(|000\rangle)$$

## 2 De la NISQ au FT

**NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum)** désigne la génération actuelle d'ordinateurs quantiques, caractérisée par :

- un nombre intermédiaire de qubits (de quelques dizaines à quelques centaines) ;
- une durée de cohérence limitée des qubits, rendant les systèmes sensibles au bruit et aux erreurs ;
- des opérations quantiques imparfaites et bruitées ;
- l'absence de correction d'erreurs complète, faute de ressources suffisantes ;
- une utilisation d'algorithmes hybrides, combinant des traitements classiques et quantiques ;
- un potentiel pour certaines tâches spécialisées, bien que les applications pratiques restent limitées à court terme.

**FT (Fault-Tolerant Quantum Computing)** représente une étape future du développement quantique, visant une exécution fiable d'algorithmes complexes grâce à :

- des milliers voire des millions de qubits physiques permettant d'encoder des qubits logiques protégés contre les erreurs ;
- une tolérance aux erreurs matérielles, rendant possible une exécution stable sur de longues durées ;
- la possibilité d'exécuter des algorithmes quantiques universels (Shor, Grover, etc.) de façon fiable.

## Comparaison et Perspectives

Critère	Technologie NISQ	Fault Tolerant
Correction d'erreurs	Ne dispose pas de correction d'erreurs complète	Conçu pour corriger activement les erreurs quantiques
Échelle du système	Nombre limité de qubits	Nécessite beaucoup plus de qubits pour garantir la robustesse
Applications	Utile pour certaines tâches spécialisées, mais limité par le bruit	Vise des applications plus générales et puissantes
Disponibilité technologique	Déjà disponible dans les laboratoires et certaines plateformes en ligne	Encore en phase de recherche active
Durée de l'ère NISQ	Devrait se prolonger encore pendant plusieurs années	Commencera après des avancées technologiques majeures



## Algorithmes Quantiques : NISQ vs FT

Type	Nom de l'algorithme	Application principale
NISQ	VQE (Solveur Variationnel d'État Propre)	Approximation de l'énergie fondamentale de systèmes quantiques (chimie, physique).
	QAOA (Algorithme Quantique d'Optimisation Approchée)	Résolution de problèmes d'optimisation combinatoire (ex : graphes).
FT	Algorithme de Shor	Factorisation d'entiers, potentielle rupture des systèmes cryptographiques RSA.
	QPE (Estimation de Phase Quantique)	Extraction précise de phases, utilisé dans plusieurs autres algorithmes (ex : Shor).

### 3 Application aux EDP : cas de l'équation de diffusion-advection

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\phi = D\nabla^2\phi \quad (1)$$

- $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla$  : désigne ici la dérivée particulaire.
- $\phi(\mathbf{x}, t)$  : Grandeur scalaire à laquelle on s'intéresse.
- $D$  : Constante de diffusivité.
- $v$  : Vitesse de convection.

#### 3.1 Généralités

Cette équation décrit le transport d'un scalaire  $\phi$  advecté par un écoulement incompressible de vitesse  $v$ , dans un milieu de diffusivité  $D$ .

#### 3.2 Discrétisation de l'équation de diffusion

On commence par discrétiser l'équation de diffusion en utilisant la méthode des différences centrées pour l'opérateur de dérivation spatiale, ce qui introduit une erreur d'approximation de l'ordre  $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ .

L'opérateur de dérivation temporelle peut être également modélisé à l'aide d'une différence avant (*forward difference*) qui introduit une erreur d'approximation de l'ordre  $\mathcal{O}(\Delta t)$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi}{\partial x}(x, t) &\approx \frac{\phi(x + \Delta x, t) - \phi(x - \Delta x, t)}{2\Delta x} \\ \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}(x, t) &\approx \frac{\phi(x + \Delta x, t) - 2\phi(x, t) + \phi(x - \Delta x, t)}{(\Delta x)^2} \\ \frac{\partial\phi}{\partial t}(x, t) &\approx \frac{\phi(x, t + \Delta t) - \phi(x, t)}{\Delta t} \end{aligned}$$

Soit l'intervalle spatial  $[a, b]$  dans lequel varie le scalaire  $\phi$ , où  $a$  et  $b$  sont choisis selon le problème étudié. On discrétise cet intervalle en  $N_x$  points espacés uniformément, ce qui donne :

$$x_m = a + m \Delta x, \quad \text{avec} \quad \Delta x = \frac{b - a}{N_x - 1}, \quad m = 0, 1, \dots, N_x - 1.$$

De manière analogue, on considère une discrétisation de l'intervalle temporel  $[0, t_f]$  en  $N_t$  points également espacés. On définit ainsi les instants discrets par :

$$t_i = i \Delta t, \quad \text{où} \quad \Delta t = \frac{t_f}{N_t - 1}, \quad i = 0, 1, \dots, N_t - 1.$$

On adopte la notation suivante pour les valeurs discrètes de  $\phi$  :

$$\phi_{m,i} = \phi(x_m, t_i)$$

où  $x_m$  et  $t_t$  sont les points de discrétisation spatiale et temporelle respectivement.

Pour chaque instant  $t$ , on introduit le vecteur colonne des valeurs spatiales de  $\phi$  :

$$\phi_t = \begin{bmatrix} \phi_{0,t} \\ \phi_{1,t} \\ \vdots \\ \phi_{N_x-1,t} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N_x}$$

En utilisant ces notations, on discrétise l'équation (1).

$$\forall m, t \quad \frac{\phi_{m,t+1} - \phi_{m,t}}{\Delta t} + v \cdot \frac{\phi_{m+1,t} - \phi_{m-1,t}}{2\Delta x} = D \cdot \frac{\phi_{m+1,t} - 2\phi_{m,t} + \phi_{m-1,t}}{(\Delta x)^2}$$

En isolant  $\phi_{m,t+1}$ , on obtient :

$$\phi_{m,t+1} = \left(r_h + \frac{r_a}{2}\right) \phi_{m-1,t} + (1 - 2r_h) \phi_{m,t} + \left(r_h - \frac{r_a}{2}\right) \phi_{m+1,t}$$

avec les paramètres adimensionnels suivants :

$$r_h = \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2}, \quad r_a = \frac{v\Delta t}{\Delta x}$$

Ce schéma peut être exprimé en notation vectorielle sous la forme :

$$\phi_{t+1} = A\phi_t$$

où  $A \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x}$  est une matrice *circulante* définie par :

$$A = \begin{bmatrix} 1 - 2r_h & r_h - \frac{r_a}{2} & 0 & \cdots & r_h + \frac{r_a}{2} \\ r_h + \frac{r_a}{2} & 1 - 2r_h & r_h - \frac{r_a}{2} & \ddots & \vdots \\ 0 & r_h + \frac{r_a}{2} & 1 - 2r_h & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & r_h - \frac{r_a}{2} \\ r_h - \frac{r_a}{2} & \cdots & 0 & r_h + \frac{r_a}{2} & 1 - 2r_h \end{bmatrix}$$

On décompose cette matrice  $A$  en la somme d'un opérateur  $\hat{A}$  et d'un opérateur unitaire  $S$  (*facilement implémentable*)

$$\frac{A}{1 - 2r_h} = \hat{A} + \frac{2r_h}{1 - 2r_h} S$$

où  $S$  est la matrice de permutation circulaire définie par :

$$S = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

L'objectif de cette décomposition est de ramener le problème à des opérations unitaires, compatibles avec l'architecture des ordinateurs quantiques.

### 3.3 Encodage de $\hat{A}$ via simulation hamiltonienne

Pour approximer l'action de  $\hat{A}$  sur un état, on recourt à la technique de **block encoding**, en utilisant une simulation hamiltonienne.

#### Remarque (*block encoding*)

Le **block encoding** est une technique permettant de représenter une matrice arbitraire  $A$  *qui n'est généralement pas unitaire* à l'intérieur d'une **matrice unitaire** plus grande, souvent utilisée dans les algorithmes quantiques.

Concrètement, on encode  $A$  comme un sous-bloc (*généralement en haut à gauche*) d'une matrice unitaire  $U$ , de sorte que :

$$U = \begin{bmatrix} A/\alpha & * \\ * & * \end{bmatrix}$$

où  $\alpha$  est une constante de normalisation.

Cette méthode permet alors d'utiliser des **opérateurs non unitaires** dans des circuits quantiques, en les manipulant indirectement via des opérations unitaires compatibles avec la mécanique quantique.

On introduit pour cela la matrice hermitienne suivante :

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -i\hat{A}^\dagger \\ i\hat{A} & 0 \end{bmatrix}$$

Puisque  $H$  est hermitienne, l'opérateur d'évolution unitaire associé est donné par :

$$U(\theta) = e^{-iH\theta}$$

Ce circuit unitaire encode l'opérateur  $\hat{A}$  dans un sous-bloc de  $U(\theta)$ .

L'objectif est alors d'extraire efficacement l'état  $\hat{A}|\phi_t\rangle$  à l'issue de cette simulation.

Une forme plus détaillée de l'exponentielle de  $H$  est donnée par :

$$e^{-iH\theta} = \begin{bmatrix} \cos(\theta\sqrt{\hat{A}^\dagger\hat{A}}) & -\hat{A}^\dagger \frac{\sin(\theta\sqrt{\hat{A}\hat{A}^\dagger})}{\sqrt{\hat{A}\hat{A}^\dagger}} \\ \hat{A} \frac{\sin(\theta\sqrt{\hat{A}^\dagger\hat{A}})}{\sqrt{\hat{A}^\dagger\hat{A}}} & \cos(\theta\sqrt{\hat{A}\hat{A}^\dagger}) \end{bmatrix} \quad (2)$$

Comme mentionné dans [4], la structure particulière de  $\hat{A}$  permet de simplifier cette expression via une approximation.

En posant :

$$r = \frac{2r_h + r_a}{1 - 2r_h}$$

ce paramètre peut être rendu arbitrairement petit en ajustant les pas de discrétisation  $(N_x, N_t)$ . On peut alors approximer :

$$\sqrt{\hat{A}\hat{A}^\dagger} = I + \mathcal{O}(r^2), \quad \sqrt{\hat{A}^\dagger\hat{A}} = I + \mathcal{O}(r^2) \quad (3)$$

Dans la limite où  $r \rightarrow 0$ , on a donc l'approximation suivante :

$$e^{-iH\theta} \approx \begin{bmatrix} \cos(\theta)I & -\sin(\theta)\hat{A}^\dagger \\ \sin(\theta)\hat{A} & \cos(\theta)I \end{bmatrix}$$

En particulier, pour  $\theta = \frac{\pi}{2}$  :

$$e^{-i\frac{\pi}{2}H} \approx \begin{bmatrix} 0 & -\hat{A}^\dagger \\ \hat{A} & 0 \end{bmatrix}$$

Ainsi, en appliquant cette évolution unitaire à l'état initial  $|0\rangle \otimes |\phi_t\rangle$ , on obtient :

$$e^{-i\frac{\pi}{2}H}(|0\rangle \otimes |\phi_t\rangle) \approx |1\rangle \otimes \hat{A}|\phi_t\rangle$$

### 3.4 Algorithme de combinaison linéaire d'unitaires (LCU)

Maintenant que l'opérateur  $\hat{A}$  a été encodé sous forme unitaire à l'aide d'une simulation hamiltonienne, il reste à reconstituer la matrice  $A$  dans son ensemble. Pour cela, il faut y ajouter la contribution de l'opérateur  $S$  avec les coefficients appropriés.

C'est précisément le rôle de l'algorithme de *combinaison linéaire d'unitaires* (Linear Combination of Unitaries, LCU), tel que détaillé dans [3]. Cet algorithme permet d'implémenter efficacement un opérateur  $M$  exprimé comme une combinaison linéaire de matrices unitaires :

$$M = \sum_j \alpha_j U_j, \quad \text{où chaque } U_j \text{ est unitaire, et } \alpha_j \in \mathbb{R}^+.$$

Dans notre cas, on a :

$$\frac{A}{1-2r_h} = \hat{A} + \frac{2r_h}{1-2r_h} S$$

et l'objectif est donc de construire une opération unitaire approximant cette combinaison linéaire.

Pour cela, on introduit l'opérateur unitaire suivant :

$$V = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{a_0}{a_0+a_1}} & -\sqrt{\frac{a_1}{a_0+a_1}} \\ \sqrt{\frac{a_1}{a_0+a_1}} & \sqrt{\frac{a_0}{a_0+a_1}} \end{bmatrix}$$

avec  $a_0 = 1$  et  $a_1 = \frac{2r_h}{1-2r_h}$

La porte  $V$  crée la superposition pondérée avec des coefficients particuliers bien choisis pour regagner notre  $A$  à la suite.

### 3.5 Implémentation du circuit en 1D

#### 3.5.1 Implémentation des Portes Quantiques

**Porte  $V$**  Unitaire à un qubit, décomposable en rotations

**Exponentielle Hamiltonienne  $e^{-i\frac{\pi}{2}H}$**  Implémentée via **décomposition de Trotter-Suzuki**

**Opérateur Shift  $S$**  Réalisé par QFT (transformée de Fourier discrète)

(Voir annexe pour plus de détail)

### 3.5.2 Schéma du circuit quantique

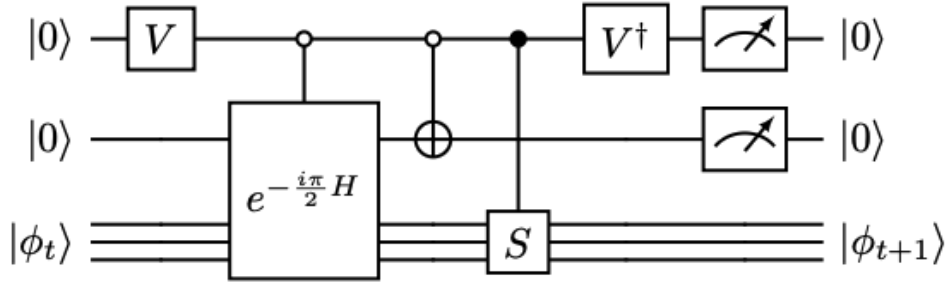


Figure 2: Circuit en 1D

Vérifions que le circuit suivant nous aident à regagner  $A$  :

$$\begin{aligned}
 &\xRightarrow{(1)} V |0\rangle |0\rangle |\phi_t\rangle \\
 &\xRightarrow{(2)} \left( \sqrt{\frac{a_0}{a_0 + a_1}} |0\rangle + \sqrt{\frac{a_1}{a_0 + a_1}} |1\rangle \right) |0\rangle |\phi_t\rangle \\
 &\xRightarrow{(3)} \sqrt{\frac{a_0}{a_0 + a_1}} |0\rangle |1\rangle \hat{A} |\phi_t\rangle + \sqrt{\frac{a_1}{a_0 + a_1}} |1\rangle |0\rangle |\phi_t\rangle \\
 &\xRightarrow{(4)} \sqrt{\frac{a_0}{a_0 + a_1}} |0\rangle |0\rangle \hat{A} |\phi_t\rangle + \sqrt{\frac{a_1}{a_0 + a_1}} |1\rangle |0\rangle |\phi_t\rangle \\
 &\xRightarrow{(5)} \sqrt{\frac{a_0}{a_0 + a_1}} |0\rangle |0\rangle \hat{A} |\phi_t\rangle + \sqrt{\frac{a_1}{a_0 + a_1}} |1\rangle |0\rangle S |\phi_t\rangle \\
 &\xRightarrow{(6)} \sqrt{\frac{a_0}{a_0 + a_1}} V^\dagger |0\rangle |0\rangle \hat{A} |\phi_t\rangle + \sqrt{\frac{a_1}{a_0 + a_1}} V^\dagger |1\rangle |0\rangle S |\phi_t\rangle \\
 &\xRightarrow{(7)} |0\rangle |0\rangle \left( \frac{a_0}{a_0 + a_1} \hat{A} + \frac{a_1}{a_0 + a_1} S \right) |\phi_t\rangle + |1\rangle |0\rangle * \\
 &\xRightarrow{(8)} |0\rangle |0\rangle A |\phi_t\rangle + |1\rangle |0\rangle *
 \end{aligned}$$

\* fait référence à un qubit qui ne contient pas l'information sur  $A |\phi_t\rangle$ , et qui ne nous intéresse pas.

Maintenant que nous avons correctement implémenté le circuit permettant de passer de  $|\phi_t\rangle$  à  $|\phi_{t+1}\rangle$ , il est possible, à partir de la préparation de  $|\phi_0\rangle$ , d'appliquer ce circuit en boucle pour obtenir n'importe quel état  $|\phi_t\rangle$ .

### 3.6 Analyse de Performance

#### Ressources quantiques

Nombre de qubits requis :  $\lceil \log_2 N_x \rceil + 2$  ( $V \otimes e^{-i\frac{\pi}{2}H}$  de taille  $4N_x \times 4N_x$ ).

#### Gestion des erreurs

L'approximation de  $|\phi\rangle$  avec précision  $\epsilon$  est contrôlé par :

- Erreur temporelle :  $\mathcal{O}(\Delta t)$  (Euler explicite)
- Erreur hamiltonienne :  $\mathcal{O}(r^2)$  ( $r = r_h + r_a$ )

Pour  $\epsilon$  donné :

$$\begin{aligned} \Delta t &\sim \epsilon, & (r_h + r_a)^2 &\sim \epsilon \\ N_t &\sim t_f/\epsilon, & N_x &\sim 1/\sqrt{\epsilon} \end{aligned}$$

où  $\sim$  désigne l'ordre de grandeur.

### 3.7 Simulation Python

Pour valider notre circuit quantique, nous résolvons l'équation différentielle (1) avec :

- Condition initiale :  $\phi(x, 0) = \sin(2\pi x)$  pour  $x \in [0, 1]$
- Conditions aux limites *périodiques* :  $u(0, t) = u(1, t)$

#### Paramètres de simulation

Paramètre	Valeur
$N_x$ (points spatiaux)	$2^9$
$N_t$ (pas temporels)	$10^5$
$r$	$5.22 \times 10^{-3}$

Le choix de  $N_x$  comme puissance de 2 optimise l'exécution du code quantique.

## Comparaison Quantique-Classique

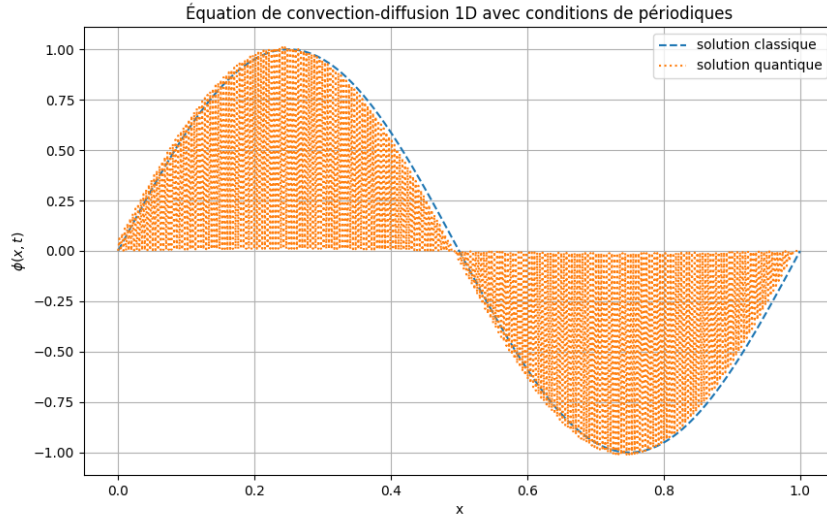


Figure 3: Comparaison des solutions quantique et classique

### Analyse d'erreur

- **Erreur  $L^2$ :**

$$\text{err}_t^{L^2} = \frac{\|\phi_t^{\text{quant}} - \phi_t^{\text{class}}\|_{L^2}}{\|\phi_t^{\text{class}}\|_{L^2}}$$

$$\text{où } \|\phi_t\|_{L^2} = \sqrt{\sum_{i=0}^{N_x-1} |\phi_{i,t}|^2}$$

- **Erreur  $L^\infty$ :**

$$\text{err}_t^\infty = \frac{\|\phi_t^{\text{quant}} - \phi_t^{\text{class}}\|_\infty}{\|\phi_t^{\text{class}}\|_\infty}$$

$$\text{avec } \|\phi_t\|_\infty = \max_{0 \leq i \leq N_x-1} |\phi_{i,t}|$$

```
Les erreurs relatives en norme L2 : [np.float64(0.7003588789394171)]
Les erreurs relatives en norme Linf : [np.float64(0.9891889001080785)]
```

Figure 4: Évolution des erreurs relative

## 4 Conclusion

Ce projet a exploré l'application de l'informatique quantique à la résolution de l'équation de diffusion-advection, en combinant des techniques avancées comme la simulation hamiltonienne et l'algorithme LCU (*Linear Combination of Unitaries*). Les résultats montrent que :

- **Efficacité Quantique** : L'approche permet une résolution avec une complexité potentiellement réduite par rapport aux méthodes classiques, tout en conservant une précision contrôlée via les paramètres de discrétisation.
- **Validation Numérique** : Les simulations Python ont confirmé la cohérence entre les solutions quantique et classique, malgré des erreurs relatives à optimiser (p.ex., 0.70 en norme  $L^2$ ).
- **Perspectives** : Bien que prometteuse pour les calculateurs FT (*Fault-Tolerant*), l'implémentation sur les dispositifs NISQ actuels reste limitée par le bruit et les erreurs.

## Améliorations Possibles

- Intégration de corrections d'erreurs quantiques.
- Extension à des conditions aux limites non périodiques.
- Optimisation des portes quantiques pour réduire la profondeur des circuits.

Ce travail illustre le potentiel des algorithmes quantiques pour les EDP, tout en soulignant les défis pratiques à relever pour leur adoption large.

## References

- [1] L. Lin, *Lecture Notes on Quantum Algorithms*, 2022.  
<https://arxiv.org/abs/2201.08309>
- [2] P. Over et al., *Quantum Algorithm for Advection-Diffusion*, 2025.  
<https://arxiv.org/abs/2410.07909>
- [3] Classiq, *Linear Combination of Unitaries*, 2023.  
[https://docs.classiq.io/latest/classiq\\_101/quantum\\_primitives\\_with\\_classiq/linear\\_combination\\_of\\_unitaries/](https://docs.classiq.io/latest/classiq_101/quantum_primitives_with_classiq/linear_combination_of_unitaries/)
- [4] Peter Brearley and Sylvain Laizet, *Quantum algorithm for solving the advection equation using Hamiltonian simulation*, 2024  
<https://journals.aps.org/prapdf/10.1103/PhysRevA.110.012430>