

Transformées de Fourier Quantique

Les transformées de Fourier Quantique sont analogues à leur équivalent classique en ce qu'il s'agit d'opérations permettant de passer d'un espace à un autre. Une transformée de Fourier classique permet de passer d'un signal (amplitude - s) à une décomposition fréquentielle (amplitude - Hz). La transformée de Fourier quantique permet de passer de l'espace des positions à l'espace des moments, et inversement.

On peut l'écrire :

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \psi(x, t) dx ; \quad \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \Phi(p, t) dp$$

Avec $\psi(x, t)$ et $\Phi(p, t)$, fonctions d'ondes dans l'espace des positions et des moments respectivement. Cela revient à changer notre base de vecteurs propres : $|x\rangle \leftrightarrow |p\rangle$

Équivalent à la Transformée de Fourier Discrète (DFT)

Le terme « Transformée de Fourier Quantique » désigne généralement l'équivalent quantique de la Transformée de Fourier Discrète. Cette dernière transformée classique agit sur un vecteur (x_0, \dots, x_n) et le converti en un nouveau vecteur (y_0, \dots, y_n) :

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} x_n \omega_N^{-nk} \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1$$

Avec $\omega_N = e^{i\frac{2\pi}{N}}$ la N-ième racine de l'unité.

De manière analogue, la Transformée de Fourier Quantique va effectuer la conversion d'un état $|x\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} x_n |n\rangle$ en un nouvel état $|y\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} y_k |k\rangle$ suivant la formule :

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} x_n \omega_N^{nk} \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1$$

Avec ω_N^n rotation d'angle $\frac{2\pi n}{N}$.

La Transformée de Fourier Quantique inverse est donnée par :

$$x_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} y_k \omega_N^{-nk} \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1$$

De manière plus immédiate, la transformée de Fourier Quantique est utilisée pour convertir une valeur binaire (base computationnelle¹) en phases. Cela signifie que tous les qubits seront placés dans une superposition à proportion égale de leurs deux états $|0\rangle$ et $|1\rangle$, et la différence de phase

¹Base computationnelle : Base sans superposition d'états ; tous les qubits sont dans un état $|0\rangle$ ou $|1\rangle$ donné.

entre ces deux états dépendra de la configuration binaire initiale. Concrètement, cela se calcul ainsi :

- Pour un n-ième qubit : si son état initial est $|1\rangle$, alors son état final présentera une différence de phase de π . Si son état initial est $|0\rangle$, aucune différence ne sera observée.
- Pour tout n+p-ième qubit : si son état initial est $|1\rangle$, alors celui-ci ajoutera une différence de phase de $\frac{\pi}{2^p}$ à l'état final du n-ième qubit. Il n'aura aucun impact pour un état initial à $|0\rangle$.

Par exemple, donnons l'état initial d'un système quelconque : $|01101\rangle$, nous alors aurons les états finaux de chacun des qubits :

$$Q0 : |0\rangle + e^{i(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{16})}|1\rangle ; Q1 : |0\rangle + e^{i(\pi + \frac{\pi}{8})}|1\rangle$$

$$Q2 : |0\rangle + e^{i(\pi + \frac{\pi}{4})}|1\rangle ; Q3 : |0\rangle + e^{i\frac{\pi}{2}}|1\rangle ; Q4 : |0\rangle + e^{i\pi}|1\rangle$$

Implémentation en portes quantiques sur n qubits

Le circuit utilisé pour implémenter la Transformée de Fourier Quantique utilise deux portes quantiques :

- La porte de Hadamard : $H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, utilisée pour placer un état $|0\rangle$ ou $|1\rangle$ en superposition.
- La porte de changement de phase contrôlée : $PH(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}$, utilisée pour augmenter la différence de phase entre les états superposés $|0\rangle$ et $|1\rangle$, à condition qu'une porte de contrôle se trouve dans l'état $|1\rangle$.

Celles-ci sont organisées telles que dans le circuit ci-dessous. Le nombre de portes appliquées évolue en $O(n^2)$.

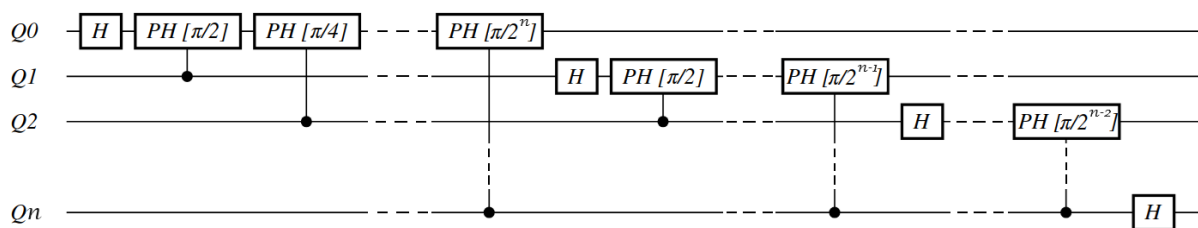


Figure 1 : schéma du circuit quantique de la Transformée de Fourier Quantique (équivalent DFT)

Équivalent à la Transformée de Fourier Rapide (FFT)

Dans le cas des systèmes fermioniques à 2^n qubits, il est possible d'appliquer un équivalent de la Transformée de Fourier Rapide. Elle consiste en deux Transformées de Fourier en parallèle sur 2^{n-1} qubits, elles même divisibles en deux nouvelles transformées, et ainsi de suite.

L'objectif est alors de convertir des modes fermioniques dans l'espace des moments.

Son expression est la suivante :

$$b_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=1}^n e^{i\frac{2\pi j}{n}k} c_j^\dagger \quad k = -\frac{n}{2} + 1, \dots, \frac{n}{2}$$

Avec c_j^\dagger l'opérateur création fermionique s'appliquant sur l'état j .

On a la décomposition entre valeurs paires et impaires que l'on peut exploiter :

$$\sum_{j=0}^{n-1} e^{i\frac{2\pi k}{n}j} c_j^\dagger = \sum_{j'=0}^{n/2-1} \left(e^{i\frac{2\pi k}{n/2}j'} c_{2j'}^\dagger + e^{i\frac{2\pi k}{n}} e^{i\frac{2\pi k}{n/2}j'} c_{2j'+1}^\dagger \right)$$

Implémentation en portes quantiques sur 2^n qubits

Trois portes quantiques spéciales sont ici utilisées :

- Une porte « séparatrice de faisceaux » : $F_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
- Une porte de « retard de phase » : $\omega_n^k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{2\pi k}{n}} \end{pmatrix}$
- Une porte d'échange fermionique (fermionic SWAP) : $fSWAP = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

La porte fSWAP prend en compte l'antisymétrie des fonctions d'onde dans les systèmes fermioniques, inverser la position de deux fermions existants (état $|11\rangle$) demande d'appliquer un signe « - ».

Nous donnons ici leur décomposition exacte en portes usuelles :

- Porte « séparatrice de faisceaux » :

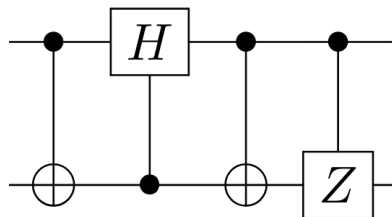


Figure 2 : décomposition en portes usuelles de la porte « séparatrice de faisceaux »

- Porte de « retard de phase » :

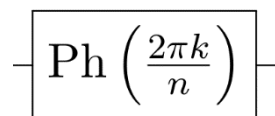


Figure 3 : décomposition en portes usuelles de la porte « retard de phase »

- Porte fSWAP :

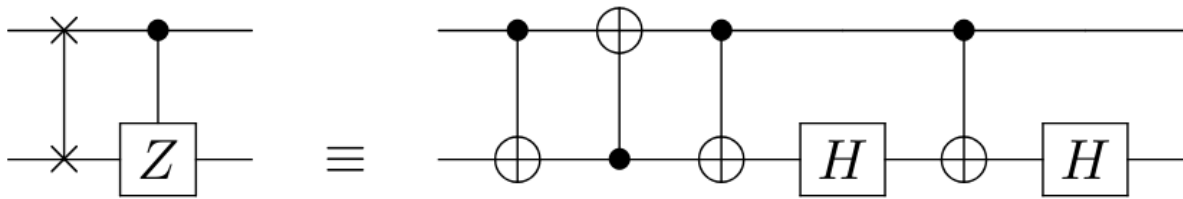


Figure 4 : décomposition en portes usuelles de la porte « fSWAP »

Soit un bloc « Transformée de Fourier Quantique Fermionique » sur 2^n qubits, la méthode exacte pour la décomposer en deux blocs de 2^{n-1} qubits est la suivante [1]. Nous parlons ici de « câble » en lien avec les tracés des schémas de circuits quantiques, il ne s'agit en aucun cas de câbles réels.

- 1) Définir deux blocs de 2^{n-1} qubits.
- 2) Le 1^{er} bloc prend en entrée tous les câbles pairs ($n^0, 2, 4, 6, \dots$) dans l'ordre croissant
Le 2^{ème} bloc prend en entrée tous les câbles impaires ($n^1, 3, 5, 7, \dots$) dans l'ordre croissant
- 3) Tous les câbles du 2^{ème} bloc subissent un retard de phase $\omega_{2^n}^i$ pour i variant de 0 à $2^{n-1}-1$.
- 4) Chaque x -ième câble du premier bloc subit une « séparation de faisceau » (F_2) avec le x -ième câble du second bloc.

Cette méthode est illustrée ci-dessous pour un cas à 8 qubits :

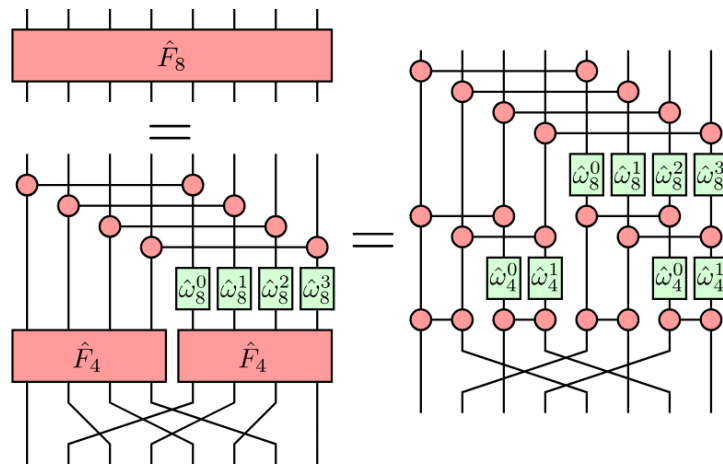


Figure 5 : schéma du circuit utilisé pour réaliser la Transformée de Fourier Quantique (équivalent FFT) sur 8 sites fermioniques ; lecture de bas en haut (source [1])

Puisque l'on travaille avec des fermions, tout échange de positions des « câbles » doit être réalisé par des portes fSWAP.

Dans de nombreuses architectures d'ordinateurs quantiques, tous les qubits ne sont pas directement connectés, des portes quantiques ne peuvent donc pas être appliquées entre tous les qubits, mais seulement entre qubits adjacents. Il faut alors adapter l'architecture en ajoutant de nouvelles portes fSWAP pour appliquer les portes « séparatrices de faisceaux » entre câbles initialement non-adjacent [2],[3]. L'architecture prend alors la forme suivant :

- à 4 qubits :

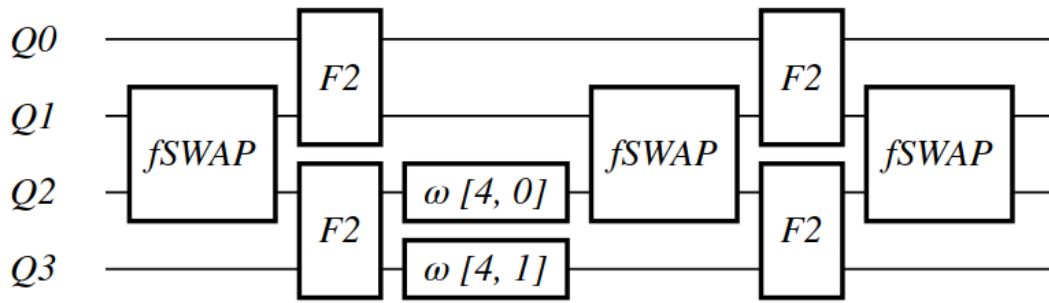


Figure 6 : schéma du circuit utilisé pour réaliser la Transformée de Fourier Quantique (équivalent FFT) sur 4 sites fermioniques adjacents entre voisins

- à 8 qubits :

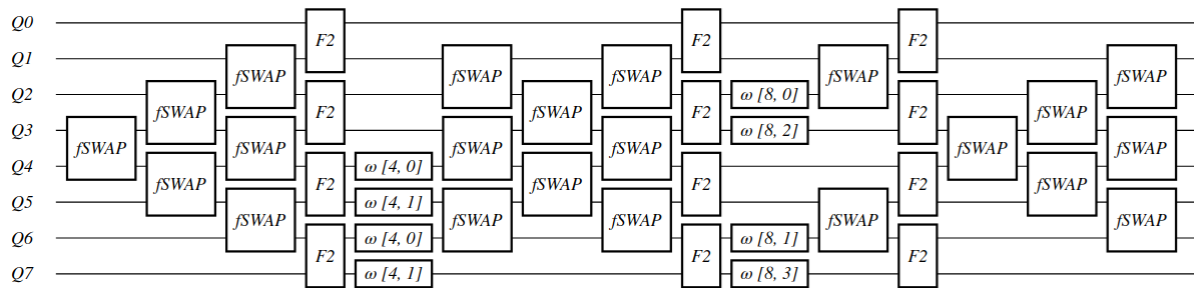


Figure 7 : schéma du circuit utilisé pour réaliser la Transformée de Fourier Quantique (équivalent FFT) sur 8 sites fermioniques adjacents entre voisins

- à 16 qubits :

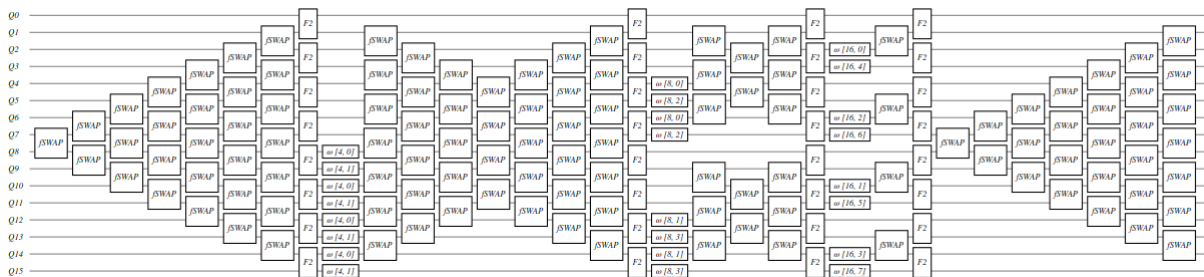


Figure 8 : schéma du circuit utilisé pour réaliser la Transformée de Fourier Quantique (équivalent FFT) sur 16 sites fermioniques adjacents entre voisins

Les derniers fSWAP permettent de replacer les câbles dans l'ordre adéquat, tel que représenté en figure 5.

Bibliographie de la Transformée de Fourier Fermionique

- [1] A. J. Ferris, « Fourier Transform for Fermionic Systems and the Spectral Tensor Network », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, n° 1, p. 010401, juill. 2014, doi: 10.1103/PhysRevLett.113.010401.
- [2] F. Verstraete, J. I. Cirac, et J. I. Latorre, « Quantum circuits for strongly correlated quantum systems », *Phys. Rev. A*, vol. 79, n° 3, p. 032316, mars 2009, doi: 10.1103/PhysRevA.79.032316.
- [3] A. Cervera-Lierta, « Exact Ising model simulation on a quantum computer », *Quantum*, vol. 2, p. 114, déc. 2018, doi: 10.22331/q-2018-12-21-114.