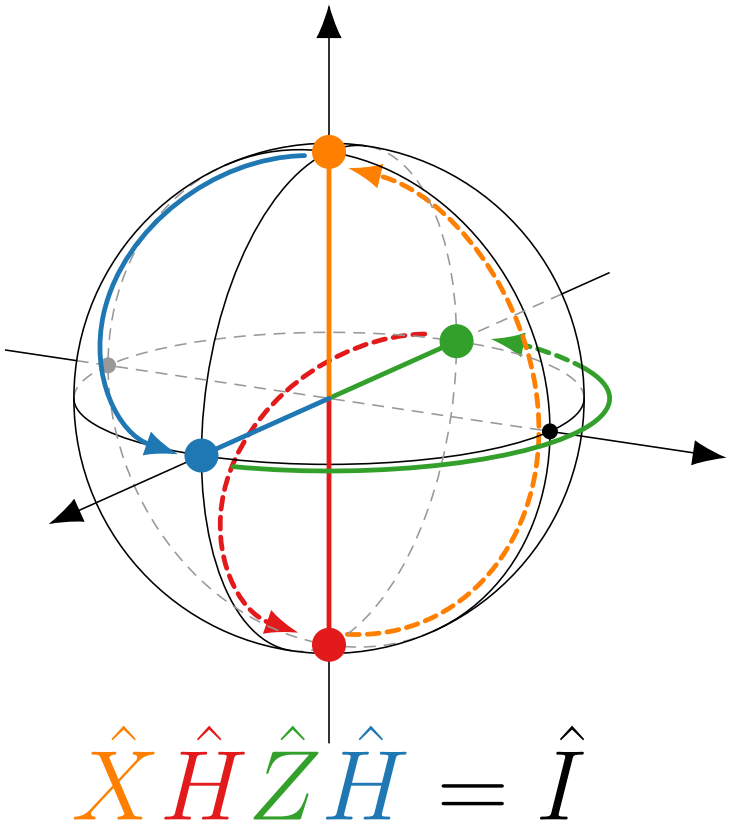
Introduction au calcul quantique

Sciences de l'information quantique

par

Maxime Dion



Compilé le 29 août 2023
Version numérique régulièrement mise à jour.
Pensez-y avant d'imprimer.

AlgoLab Quantique

Institut Quantique

UdS Université de Sherbrooke

Table des matières

Chapitre 0

Introduction

L'objectif de ce premier chapitre est d'introduire un certain nombre de concepts clés afin d'aborder l'information, le calcul et la programmation quantique. Ces concepts seront ensuite détaillés et formalisés dans les chapitres suivants.

Avant l'informatique quantique, se trouve l'informatique tout court ou l'informatique *classique*. Il nous sera utile de comprendre trois concepts liés à l'information classique : le bit, la chaine de bits et l'encodage. On s'appuiera ensuite sur ces concepts à la base de l'information classique pour mieux entrevoir les différences qu'apporte l'information quantique.

A L'information classique

L'information est un concept qui peut être difficile à définir. Il existe une définition très formelle de l'information, dans le contexte de la théorie de l'information, imaginée par Claude Shannon dans son article *A Mathematical Theory of Communication* publié en 1948.

Dans le cadre d'une introduction à la programmation quantique, on peut se limiter à introduire brièvement les concepts fondamentaux qui sont absolument essentiels. Ces mêmes concepts et de nombreux autres plus avancés pourront être traités rigoureusement dans le cadre de cours sur la théorie de l'information et du calcul.

A.1 Le bit

Les ordinateurs que nous utilisons actuellement sont des machines qui traitent de l'information. Ils la traitent tous sous une forme particulièrement simple : le *bit* d'information. Le mot *bit* signifie chiffre binaire ou *binary digit* en anglais. Le bit d'information ne peut prendre que deux valeurs :

0 et 1.

On peut attribuer différentes significations à celles-ci pour qu'elles portent de l'information. Par exemple, les valeurs 0 et 1 pourraient respectivement vouloir dire : Faux et Vrai, Non et Oui, Face et Pile, Bleu et Rouge, Chat et Chien, Mort et Vivant, etc. La signification qu'on attribue à ces valeurs est l'*encodage*. On y reviendra à la section A.3.

En pratique, le bit d'information est stocké dans un système physique comme un transistor. Un transistor peut être vu comme un simple interrupteur qui peut être placé dans un des deux états possibles : ouvert ou fermé. La valeur du bit associé est 0 lorsque le transistor est ouvert et 1 lorsqu'il est fermé.

Remarque

Notez que n'importe quel système physique qui peut être placé dans deux états possibles et peut être manipulé à volonté peut être utilisé pour stocker un bit d'information. À savoir s'il s'agit d'un bon choix de système, ça, c'est une tout autre question !

A.2 La chaine de bits

En assemblant plusieurs bits d'information ensemble, on peut générer plus de possibilités. Par exemple, avec deux bits d'information on peut construire quatre combinaisons [1]

$$00, \quad 01, \quad 10 \quad \text{ou} \quad 11$$

Un ensemble de bits mis bout à bout constitue une chaine de bits. La longueur d'une chaine de bits est égale au nombre de bits qui la composent. Par exemple,

$$0110101 \quad \text{et} \quad 00000$$

sont des chaines de bits de longueur 7 et 5 respectivement.

Exercice A.1 : Dénombrer les chaines de bits

Combien de chaines de bits différentes peut-on construire avec

a) 3 bits,

b) 4 bits,

c) 5 bits,

d) n bits ?

A.3 L'encodage

L'encodage permet d'attribuer une signification à chaque chaine de bits. L'encodage en entier est extrêmement utile et revient constamment en informatique quantique. Il est cependant possible d'attribuer d'autres significations à des chaines de bits et nous en donnerons un exemple.

Entiers

D'abord une chaine de bits peut être la représentation binaire d'un entier. Par exemple, le tableau 1 dresse l'encodage des 8 premiers entiers ($j = 0$ à 7) à l'aide de trois bits d'information.

$b_2 b_1 b_0$	j
0 0 0	0
0 0 1	1
0 1 0	2
0 1 1	3
1 0 0	4
1 0 1	5
1 1 0	6
1 1 1	7

TABLE 1 – Représentations binaires et décimales des 8 premiers entiers.

Notez que pour une chaine de bits générale on identifie chacun des bits par des variables binaires b_0, b_1, etc. On commence la numération avec l'indice 0 et, pour une chaine de n bits, elle se termine avec l'indice $n-1$. Cela fait en sorte que pour une chaine de bits générale $b_{n-1} \cdots b_1 b_0$, on peut calculer l'entier j qu'elle représente grâce à la formule

$$j = \sum_{q=0}^{n-1} b_q 2^q.$$

1. On fait sporadiquement usage de la couleur dans ce texte lorsque cela permet de faciliter la lecture, par exemple ici, le bit le plus à gauche sera en bleu et le bit le plus à droite, en rouge.

Exemple A.1 : De binaire à décimal

Convertissons la chaine de 3 bits 110 en un entier.

$$\sum_{q=0}^{2} b_q 2^q = b_0 2^0 + b_1 2^1 + b_2 2^2 = 0 \times 1 + 1 \times 2 + 1 \times 4 = 6.$$

Info notation A.1 : Le bit le plus (le moins) significatif

Dans la décomposition d'un entier en un nombre binaire ($b_{n-1} \cdots b_1 b_0$), chaque bit est associé à une puissance de 2 (1, 2, 4, 8, ..., 2^{n-1}). Le bit associé à la plus grande puissance de 2 est dit le plus significatif (b_{n-1}). Par opposition, le bit associé à la plus petite puissance de 2 est dit le moins significatif (b_0).

Info notation A.2 : Boutisme

Le boutisme (*endianness* en anglais) indique dans quel ordre les bits doivent être lus afin d'interpréter la chaine de bits. On distingue le petit-boutisme (*little-endian*) et le gros-boutisme (*big-endian*) par l'importance qu'a le dernier bit de la chaine de bits. Par exemple, le nombre 4 (sur 3 bits) s'écrit

$$100 \quad \text{ou} \quad 001$$

en petit-boutisme ou gros-boutisme respectivement. La convention petit-boutisme est plus cohérente avec la manière qu'on écrit nos nombres décimaux. En effet, le symbole le plus à gauche est le plus significatif et celui le plus à droite est le moins significatif. Ainsi, à moins d'avis contraire, la convention de petit-boutisme sera utilisée dans ce texte.

Exercice A.2 : Conversion binaire-décimale

Convertissez les nombres binaires suivants en entiers décimaux.

a) 1000,
b) 001000,
c) 010110,
d) 01001000.

La conversion d'un entier en une chaine de bits revient à identifier la chaine de bits $b_{n-1} \cdots b_1 b_0$ de sorte que la somme

$$\sum_{q=0}^{n-1} b_q 2^q = b_0 2^0 + b_1 2^1 + b_2 2^2 + \ldots + b_{n-1} 2^{n-1} = j$$

resulte dans l'entier recherché.

Exemple A.2 : De décimal à binaire (première méthode)

Utilisons une première méthode pour convertir l'entier 22 en une chaine de bits. On doit d'abord identifier le nombre minimum de bits nécessaires. L'entier 22 se trouve entre les puissances de 2, $2^4 = 16$ et $2^5 = 32$: nous aurons donc besoin de 5 bits.

Ensuite, on tente de soustraire de l'entier chacune des puissances de 2, en ordre décroissant tout en s'assurant que le résultat est un nombre positif. Si la soustraction est possible, le bit associé à cette puissance de 2 est 1, sinon il est 0.

$$\begin{aligned} 22 - b_4 \times 2^4 = 22 - b_4 \times 16 = 6 \quad & b_4 = 1 \\ 6 - b_3 \times 2^3 = 6 - b_3 \times 8 = 6 \quad & b_3 = 0 \\ 6 - b_2 \times 2^2 = 6 - b_2 \times 4 = 2 \quad & b_2 = 1 \\ 2 - b_1 \times 2^1 = 2 - b_1 \times 2 = 0 \quad & b_1 = 1 \\ 0 - b_0 \times 2^0 = 0 - b_0 \times 1 = 0 \quad & b_0 = 0 \end{aligned}$$

La conversion de l'entier 22 en un nombre binaire produit donc la chaine de bits

$$10110.$$

Exemple A.3 : De décimal à binaire (deuxième méthode)

Une seconde méthode consiste à diviser successivement l'entier par 2 en notant le résultat arrondi à l'entier inférieur et le reste qui est soit 0 ou 1. Ce reste peut être identifié comme le bit le moins significatif dans la chaine de bits. En répétant ces opérations, on identifie les bits de plus en plus significatifs.

Illustrons cette seconde méthode en l'appliquant encore à l'entier 22.

$$\begin{aligned} 22/2 &= 11 & 22 &= 2\times 11+0 & b_0 &= 0\\ 11/2 &= 5.5 & 11 &= 2\times 5+1 & b_1 &= 1\\ 5/2 &= 2.5 & 5 &= 2\times 2+1 & b_2 &= 1\\ 2/2 &= 1 & 2 &= 2\times 2+0 & b_3 &= 0\\ 1/2 &= 0.5 & 1 &= 2\times 0+1 & b_4 &= 1 \end{aligned}$$

On trouve la même chaine de bit que pour l'exemple précédent

$$10110.$$

Exercice A.3 : Conversion décimale-binaire

Convertissez les entiers suivants en nombres binaires. Utilisez autant de bits que nécessaire.

a) 32,
b) 48,
c) 3,
d) 789.

Exercice A.4 : Des chaines de bits caractérisitiques

Qu'est-ce qui caractérise les entiers qui sont représentés par des chaines de bits qui

a) se terminent avec un bit égal à 1 (ex : 110001) ;
b) ne comportent qu'un seul bit égal à 1 (ex : 010000) ;
c) qui sont entièrement composées de bits égals à 1 (ex : 111111) ?

Autres encodages

L'encodage ne se limite pas à des entiers et peut être utilisé pour représenter une multitude de choses comme des nombres à virgule flottante, des nombres complexes, des caractères, des catégories, etc. L'important est que tout le monde s'entende sur la signification du code utilisé.

Citons en exemple le code ASCII (*American Standard Code for Information Interchange*), un code à 7 bits qui permet de représenter de nombreux caractères régulièrement utilisés. Le tableau 2 est un extrait de ce code qui comprend toutes les lettres majuscules en plus de quelques symboles supplémentaires.

$b_6b_5b_4b_3b_2b_1b_0$	j		$b_6b_5b_4b_3b_2b_1b_0$	j		$b_6b_5b_4b_3b_2b_1b_0$	j		$b_6b_5b_4b_3b_2b_1b_0$	j	
1 0 0 0 0 0 0	64	@	1 0 0 1 0 0 0	72	H	1 0 1 0 0 0 0	80	P	1 0 1 1 0 0 0	88	X
1 0 0 0 0 0 1	65	A	1 0 0 1 0 0 1	73	I	1 0 1 0 0 0 1	81	Q	1 0 1 1 0 0 1	89	Y
1 0 0 0 0 1 0	66	B	1 0 0 1 0 1 0	74	J	1 0 1 0 0 1 0	82	R	1 0 1 1 0 1 0	90	Z
1 0 0 0 0 1 1	67	C	1 0 0 1 0 1 1	75	K	1 0 1 0 0 1 1	83	S	1 0 1 1 0 1 1	91	[
1 0 0 0 1 0 0	68	D	1 0 0 1 1 0 0	76	L	1 0 1 0 1 0 0	84	T	1 0 1 1 1 0 0	92	\
1 0 0 0 1 0 1	69	E	1 0 0 1 1 0 1	77	M	1 0 1 0 1 0 1	85	U	1 0 1 1 1 0 1	93	]
1 0 0 0 1 1 0	70	F	1 0 0 1 1 1 0	78	N	1 0 1 0 1 1 0	86	V	1 0 1 1 1 1 0	94	^
1 0 0 0 1 1 1	71	G	1 0 0 1 1 1 1	79	O	1 0 1 0 1 1 1	87	W	1 0 1 1 1 1 1	95	_

TABLE 2 – Extrait du code ASCII. Pour la liste exhaustive de ce code, visitez ce lien.

Exemple A.4 : Un code pour le divertissement

Illustrons comment des bits d'information pourraient être utilisés pour construire un code qui permet d'identifier certaines catégories de divertissement. Dans ce code le premier bit d'information identifie le médium.

b_0	Médium
0	Film
1	Livre

Le second bit d'information indique s'il s'agit d'un divertissement en anglais ou en français.

b_1	Langue
0	Anglais
1	Français

Finalement, le genre de divertissement peut être dans une des quatre catégories suivantes. On utilise donc deux bits d'information pour l'identifier.

b_3b_2	Genre
0 0	Action
0 1	Comédie
1 0	Drame
1 1	Horreur

Selon ce code, un film d'horreur en anglais pourrait donc être identifié grâce à la chaine de bits 1100.

A.4 L'informatique classique

Cela fait le tour des notions d'information classique qui nous sont essentielles afin d'aborder l'information quantique. Mentionnons néanmoins qu'un ordinateur classique actuel n'est rien d'autre qu'une machine qui traite et manipule cette information classique stockée dans un très grand nombre de bits. Ce traitement passe par des opérations qui vont modifier les valeurs des bits selon une logique déterminée. Ces opérations logiques permettent de combiner les valeurs des bits de manière à effectuer des additions, des multiplications, des comparaisons, etc.

Voyons rapidement quelques fonctions qui agissent sur des bits d'informations qui pourront nous être utiles pour traiter l'information, qu'elle soit classique ou quantique. Ces fonctions s'inscrivent plus largement dans ce qu'on appelle l'algèbre de Boole, mais nous nous limiterons aux plus fondamentales. Ces fonctions sont généralement intuitives à comprendre pourvu qu'on attribue les significations FAUX et VRAI aux bits 0 et 1 respectivement.

Fonction NON

La fonction NON (NOT en anglais) agit sur un seul bit et retourne un bit de valeur inverse. Elle a les effets suivants

$$f_{\text{NON}}(1) = 0 \quad \text{et} \quad f_{\text{NON}}(0) = 1.$$

Mathématiquement, on peut écrire l'effet de cette fonction sur un bit arbitraire grâce à une simple soustraction

$$f_{\text{NON}}(b) = 1 - b.$$

Fonction ET

La fonction ET (AND en anglais) agis sur deux bits et retourne un bit de valeur 1 si les deux bits d'entrée sont égaux à 1. Le tableau 3a illustre l'effet de cette fonction pour les quatre scénarios possibles.

b_1	b_2	$f_{\text{ET}}(b_1, b_2)$
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

(a) Fonction ET

b_1	b_2	$f_{\text{OU}}(b_1, b_2)$
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1

(b) Fonction OU

b_1	b_2	$f_{\text{XOR}}(b_1, b_2)$
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

(c) Fonction XOR

TABLE 3 – Tables de vérité pour des fonctions à deux bits.

On peut obtenir une fonction qui a cet effet en évaluant le produit de deux bits d'information

$$f_{\text{ET}}(b_1, b_2) = b_1 \times b_2.$$

Fonction OU

La fonction OU (OR en anglais) agit également sur deux bits et retourne un bit de valeur 1 si au moins un des deux bits d'entrée est égal à 1. Son effet est résumé au tableau 3b. Cette fonction peut être construite de la manière suivante

$$f_{\text{OU}}(b_1, b_2) = 1 - (1 - b_1) \times (1 - b_2).$$

Fonction OU exclusif

Finalement, la fonction OU exclusif (exclusive OR en anglais ou XOR) retourne un bit de valeur 1 si *un seul* des deux bits d'entrée est égal à 1 tel que décrit au tableau 3c. On peut écrire cette fonction comme une addition modulo 2

$$f_{\text{XOR}}(b_1, b_2) = b_1 + b_2 \pmod 2.$$

Cette opération est très fréquente en information et la notation modulo étant un peu encombrante on préfèrera utiliser l'expression suivante

$$f_{\text{XOR}}(b_1, b_2) = b_1 \oplus b_2.$$

L'addition modulo 2 peut aussi être vue comme gardant uniquement la parité du résultat d'une addition : 0 si le résultat est pair et 1 s'il est impair. Cette notation peut également être utilisée pour générer une porte NON en fixant un des bits à la valeur 1. En effet,

$$f_{\text{XOR}}(b, 1) = b \oplus 1 = f_{\text{NON}}(b)$$

en ajoutant 1 à un nombre pair, on obtient un nombre impair et vice versa.

B L'information quantique

Les concepts de bits, de chaines de bits et d'encodage se traduisent en informatique quantique et sont directement utilisables. Cependant, l'informatique quantique est une manière nouvelle et radicalement différente de traiter cette information en utilisant des phénomènes de la mécanique quantique qui n'ont pas d'équivalent classique.

En informatique classique, les bits d'information peuvent être 0 ou 1, et une seule de ces possibilités est réalisée à la fois. De la même manière, un système de n bits peut être dans l'une des 2^n configurations possibles, mais il ne sera que dans une seule de celles-ci à chaque instant.

L'informatique quantique est une nouvelle manière de traiter l'information en exploitant des phénomènes physiques qui n'ont pas d'équivalent classique : qui ne s'observent pas dans notre quotidien. Ces phénomènes sont directement issus de la mécanique quantique et sont la *superposition*, l'*intrication* et l'*interférence*. Ceux-ci seront dument décrits et expliqués dans les prochains chapitres.

B.1 Le bit quantique

Exploiter les phénomènes quantiques pour traiter de l'information nécessite d'abord de stocker cette information dans un système qui répond aux lois de la mécanique quantique. On a donc besoin de bits quantiques, aussi appelés *qubits*.

Pour qu'un système physique puisse être utilisé comme un qubit, il doit, comme pour le bit classique, pouvoir être dans deux états quantiques différents. Ces deux états, qualifiés d'*états de base*, sont notés

$$|0\rangle \text{ et } |1\rangle .$$

Mais cela n'est pas suffisant pour un qubit ! Ce système doit aussi pouvoir être placé dans un état de *superposition* de ces deux états de base. Un état de superposition est un état où le qubit est *à la fois* dans l'état $|0\rangle$ et dans l'état $|1\rangle$ *en même temps* ! Il existe un continuum d'états de superposition, c'est-à-dire que le qubit peut être dans les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ avec différentes proportions (par exemple être à 25% dans l'état $|0\rangle$ et 75% dans l'état $|1\rangle$). La propriété de superposition est la première chose qui distingue le qubit du bit classique.

B.2 Les systèmes de plusieurs bits quantiques

De manière analogue aux chaines de bits classiques, on peut assembler plusieurs qubits ensemble pour former des systèmes de plusieurs qubits. Ces systèmes peuvent alors être placés dans autant d'états que leurs variants classiques. Par exemple, un système de deux qubits peut être placé dans un des quatre états

$$|00\rangle , \quad |01\rangle , \quad |10\rangle \quad \text{et} \quad |11\rangle .$$

Les états suivants

$$|0110101\rangle \quad \text{et} \quad |00000\rangle$$

sont également des états quantiques valides pour des systèmes à 7 et 5 qubits respectivement.

La puissance de l'ordinateur quantique réside, entre autres, dans sa capacité à être placé dans un état de superposition qui implique tous les états possibles du système en même temps. Ainsi, un système de n qubits peut être placé dans un état de superposition qui implique toutes les 2^n configurations possibles. Cela permet, en théorie, d'explorer un très grand nombre de possibilités toutes en même temps, alors qu'un ordinateur classique devrait les considérer une à une.

Exemple B.1 : Combien de qubit pour...

On estime qu'il y a 1400 milliards de milliards de litres d'eau sur Terre (1400×10^{18} L). Le volume d'une goutte d'eau métrique est 0.05 mL (5×10^{-5} L). Le nombre de gouttes d'eau sur Terre est donc environ

$$\frac{1400 \times 10^{18}\,\text{L}}{0.05\,\text{mL/goutte}} = 2.8 \times 10^{25}\,\text{gouttes.}$$

Soit un ordinateur quantique de n qubits. On veut associer à chaque goutte d'eau un des 2^n états possibles de cet ordinateur quantique. Combien de qubits cela nécessite-t-il ? On cherche donc n qui répond à

$$2^n \geq 2.8e25 \quad \text{ou} \quad n \geq \log_2(2.8e25) \approx 84.53\ldots$$

Un ordinateur quantique de 85 qubits pourrait donc considérer toutes les gouttes d'eau sur Terre en même temps !

Pour un système de plusieurs qubits, il est possible que les états de certains qubits soient corrélés ; c'est-à-dire que l'état d'un qubit est *lié* à l'état d'un autre ou de plusieurs autres qubits. On parle alors d'*enchevêtrement* ou d'*intrication*. On pourrait, par exemple, préparer un système de deux qubits de sorte qu'il soit dans une superposition des états

$$|00\rangle \quad \text{et} \quad |11\rangle$$

(a) Porte à un qubit (b) Porte à deux qubits

FIGURE 1 – Diagrammes représentant des portes quantiques à un et deux qubits. Ces représentations seront utilisées pour construire des circuits quantiques.

uniquement. Les états $|01\rangle$ et $|10\rangle$ sont alors absents et les états des deux qubits sont toujours les mêmes. La propriété d'intrication est la deuxième chose qui distingue un système de qubits d'un système de bits classiques.

C La programmation quantique

Pour que l'ordinateur quantique puisse nous aider à résoudre des problèmes très complexes, il n'est pas suffisant qu'il soit capable de lister un très grand nombre d'éléments différents en même temps en étant dans un état de superposition. On doit être capable d'effectuer des opérations qui manipulent son état quantique de manière à effectuer des calculs pertinents qui nous aideront à trouver une solution au problème qu'on étudie. C'est le but de la programmation quantique : établir une série d'opérations qui modifient un état quantique de manière à effectuer un calcul et répondre à une question d'intérêt. Bien que cette description de la programmation quantique soit encore très abstraite, cela se clarifiera dans les chapitres suivants.

C.1 Les portes quantiques

Dans tous les cas, les portes quantiques constituent les outils de base qui sont à notre disposition pour modifier un état quantique. Certaines portes quantiques modifient l'état d'un seul qubit, d'autres de deux qubits ou plus. Nous verrons qu'il existe une panoplie de portes quantiques et qu'il est également possible d'en définir de nouvelles.

La figure 1 présente des diagrammes représentant de portes quantiques qui seront utilisées pour construire des circuits quantiques. On utilisera différentes étiquettes (autres que P), mais aussi différents symboles pour distinguer certaines portes quantiques.

C.2 Les circuits quantiques

Les circuits quantiques sont une manière très visuelle de représenter l'application de plusieurs portes quantiques en parallèle ou l'une à la suite de l'autre. Un circuit quantique, comme celui de la figure 2, apparait comme une portée de musique qui se lit de la gauche vers la droite. Chaque ligne correspond à un seul qubit et décrit toutes les opérations que celui-ci subira lors de l'exécution du circuit. Ces opérations peuvent être des portes à un, deux ou plusieurs qubits.

Les opérations qui forment le circuit quantique vont modifier l'état du système de qubits, en particulier ses propriétés de superposition et d'intrication, en exploitant l'*interférence*. La propriété d'interférence est la troisième et dernière chose qui distingue un système de qubits d'un système de bits classiques.

En règle générale, un circuit quantique débute avec plusieurs qubits tous dans l'état $|0\rangle$ et se termine par la mesure de certains ou de tous les qubits. Le résultat de la mesure sera notre seule source d'information sur le résultat du calcul quantique. Ce résultat devra être interprété, généralement à l'aide d'un ordinateur classique, pour tirer une conclusion et répondre (ou non) à la question ou au problème qu'on tente de résoudre.

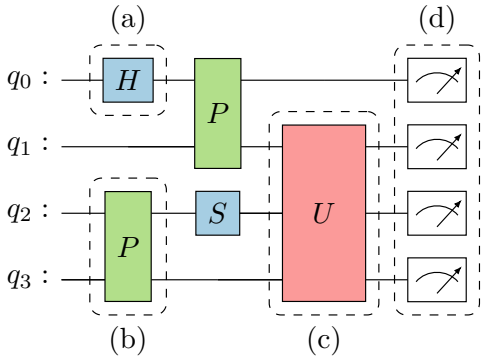


FIGURE 2 – Exemple d'un circuit quantique sur lequel se trouvent (a) des portes à un qubit, (b) des portes à deux qubits, (c) des portes composites à plusieurs qubits et (d) des mesures.

C.3 Les algorithmes quantiques

Un algorithme quantique se résume par une série d'instructions qui permet de construire un ou plusieurs circuits quantiques et de les exécuter. L'algorithme quantique décrit également comment les résultats obtenus lors de l'exécution de chacun des circuits quantiques doivent être analysés et interprétés.

Certains algorithmes quantiques fonctionnent comme une boucle de rétroaction, où l'exécution d'une première série de circuits quantiques informe la construction de nouveaux circuits qui sont eux-mêmes exécutés, et ainsi de suite.

D Notions essentielles pour la suite

Cela complète un survol très bref de la programmation quantique. Il est maintenant temps de s'y attaquer plus sérieusement et formellement. Les mathématiques joueront un grand rôle pour nous aider à démystifier les lois étranges de la mécanique quantique et pour les exploiter dans des calculs quantiques.

Parmi les outils les plus importants, mentionnons d'abord l'algèbre linéaire qui nous enseigne comment manipuler des vecteurs, des matrices et, plus généralement, des tenseurs. Le présent document ne contient pas ces notions qui devraient être acquises ailleurs. Néanmoins, l'annexe C présente un outil très utile pour *faire* de l'algèbre linéaire : la notation indicielle. La lecture de cette annexe pourrait vous intéresser si vous désirez maitriser un outil supplémentaire afin de manipuler des tenseurs de toutes sortes.

La mécanique quantique fait constamment intervenir le concept de phase qui mathématiquement se traite à l'aide des nombres complexes. L'annexe B introduit les nombres complexes d'une manière géométrique qui se veut intuitive. Si vous ne maitrisez pas parfaitement les nombres complexes, cette annexe pourrait être une lecture pertinente.

Voilà, c'est tout ! L'algèbre linéaire et les nombres complexes sont les deux seuls outils mathématiques qui sont essentiels pour s'attaquer au calcul et à la programmation quantique.

Chapitre 1

Le qubit

Là où le bit est l'unité fondamentale d'information classique, le bit quantique, communément appelé le qubit, est l'unité fondamentale d'information quantique. C'est donc le point de départ pour quiconque s'intéressant à l'informatique quantique et à la programmation quantique.

Dans ce chapitre, nous allons d'abord voir comment décrire mathématiquement l'état d'un qubit. Cela nous permettra ensuite de nous intéresser aux outils à notre disposition pour modifier et observer cet état. Nous ferrons cela en utilisant un outil mathématique parfaitement adapté : l'algèbre linéaire. Nous répondrons ainsi à une des questions les plus fondamentales de l'existence humaine : « À quoi ça sert, l'algèbre linéaire ? »

Le qubit est aussi ce qu'on appelle en mécanique quantique un système à deux niveaux ; c'est le système quantique le plus simple qu'on puisse imaginer. L'étude et la compréhension d'un qubit sont donc une excellente manière d'introduire les concepts fondamentaux de la mécanique quantique et de se familiariser avec cette science parfois contrintuitive.

A État d'un qubit

L'état d'un bit d'information classique est décrit sur la base de deux états possibles : l'état 0 et l'état 1. Le bit d'information est dans l'un de ces deux états. On dit également que le bit peut prendre les valeurs 0 ou 1.

Par analogie, l'état d'un bit d'information quantique est décrit à l'aide de deux états de base

$$|0\rangle \text{ et } |1\rangle .$$

Ces deux états sont les deux seuls auxquels le qubit a accès. Cependant, le qubit peut être dans une infinité d'états différents [1]. Cela est possible, car le qubit peut occuper les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ *en même temps* !

Info notation A.1 : Le ket

L'écriture $|\cdot\rangle$ avec une barre verticale et un angle à droite est appelée un *ket*. On s'en sert pour représenter un état quantique. Cela fait partie d'un ensemble de notations nommé la notation de Dirac qui est universellement utilisée dans le contexte de la mécanique quantique.

Notez que l'intérieur du *ket*, par exemple le 0 dans $|0\rangle$, n'est qu'une étiquette. Généralement, on tentera d'utiliser des étiquettes qui caractérisent bien l'état quantique identifié par celle-ci.

De manière générale, l'état d'un qubit est représenté comme une combinaison linéaire (somme pondérée) de ces deux états de base

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle \tag{1.1}$$

1. Ces deux dernières phrases vous semblent peut-être contradictoires. Revenez-y une fois cette section complétée pour réévaluer leur cohérence.

où α et β sont généralement des nombres complexes et sont appelés *amplitudes de probabilité* ou encore simplement *composantes* pour des raisons qui deviendront bientôt évidentes.

A.1 Superposition d'états

Lorsque le qubit est dans un état de base, une des composantes est égale à 1 et l'autre à zéro. Par exemple,

$$|\psi\rangle = |0\rangle \qquad (\alpha = 1, \beta = 0)$$
$$|\psi\rangle = |1\rangle \qquad (\alpha = 0, \beta = 1).$$

Dans tous les autres cas, le qubit est, en quelque sorte, dans un état qui *combine* ou qui *mélange* les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$. On dit alors que le qubit est en *superposition* d'états. La superposition est le premier phénomène quantique à la base du calcul quantique.

A.2 Vecteur d'état

Comme l'état d'un qubit a toujours la forme de l'équation 1.1, on est tenté (par pure paresse) de seulement fournir les valeurs de α et β pour définir $|\psi\rangle$, la première étant toujours associée à l'état de base $|0\rangle$ et la seconde à l'état de base $|1\rangle$. On peut fournir ces deux valeurs comme étant les composantes d'un vecteur d'un espace à deux dimensions

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \tag{1.2}$$

C'est ce qu'on appelle le vecteur d'état d'un qubit.

Remarque

En informatique quantique, la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ est également appelée la base computationnelle.

Remarque

Dans les présentes notes, on appelle *vecteur d'état* le tableau de composantes qui représente un état quantique dans une base donnée. C'est une interprétation *informatique* de ce qu'est un vecteur, en opposition à une définition plus *mathématique* où un vecteur existe indépendamment de la base dans laquelle il est exprimé.

Info notation A.2 : Vecteur d'état et état quantique

On utilisera souvent (presque tout le temps) l'abus de notation

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \tag{1.3}$$

pour définir un état quantique $|\psi\rangle$, même si ce n'est pas rigoureusement vrai : l'état n'est pas égal à son vecteur d'état. Ce que cette dernière égalité signifie vraiment est que l'état $|\psi\rangle$ est un état caractérisé par les composantes α et β dans la base formée par les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$.

Ce qui distingue l'état quantique du vecteur d'état est que le second est toujours exprimé dans une base donnée. Dans la plupart des cas, la base dite *computationnelle* ($\{|0\rangle, |1\rangle\}$) est sous-entendue, mais il existe d'autres bases possibles. Les composantes des vecteurs d'état représentant un même état quantique, mais dans deux bases différentes, ne seront pas égales. L'état quantique, lui, est cependant toujours pareil et ne dépend pas d'une base. Ces notions de changement de base sont plus avancées et nous y reviendrons plus tard.

À moins d'avis contraire, une égalité telle que celle de l'équation 1.3 suppose que le vecteur d'état est exprimé dans la base computationnelle.

Il est extrêmement utile de représenter l'état d'un qubit sous la forme d'un vecteur. Cela nous permet d'utiliser la force de l'algèbre linéaire pour représenter l'état d'un qubit, mais surtout pour décrire les opérations qui permettront de modifier son état.

Pour que tout cela soit cohérent, on associe les deux états de base d'un qubit aux deux vecteurs de base d'un espace à deux dimensions

$$|0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \text{ et } |1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Ceux-ci sont orthogonaux et normés (orthonormés pour faire court). Par analogie avec un vecteur général dans un espace à deux dimensions,

$$\mathbf{r} = x\,\hat{\mathbf{x}} + y\,\hat{\mathbf{y}} = x\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + y\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$$

l'état général d'un qubit est bien

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle = \alpha\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \beta\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}.$$

L'état général d'un qubit peut donc être représenté par un vecteur à deux composantes (α et β) qui sont, on le rappelle, des nombres complexes.

Exercice A.1 : Vecteurs d'état

Écrivez les vecteurs d'état des états quantiques suivants dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$:

a) $|\phi\rangle = \gamma\,|0\rangle + \delta\,|1\rangle$

b) $|\psi\rangle = a\,|1\rangle + b\,|0\rangle$

c) $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$

d) $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$

e) $|\eta\rangle = e^{i\varphi_0}(a\,|0\rangle + b\,|1\rangle)$

f) $|\theta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$

Comme on peut associer un état quantique à un vecteur d'état, certaines opérations qui sont valides pour des vecteurs le sont aussi pour des états quantiques. Par exemple, on peut multiplier un état quantique par un scalaire ou encore additionner des états quantiques, choses que l'on faisait déjà en écrivant, par exemple, l'état général d'un qubit (équation 1.1).

Info notation A.3 : Différentes notations pour les composantes

À l'équation 1.2, les composantes utilisées pour le vecteur d'état sont α et β. Lorsqu'on manipule plusieurs états quantiques à la fois, il est pratique de pouvoir identifier les composantes associées aux différents états. On utilisera alors des notations différentes. Par exemple,

$$|a\rangle = a_0\,|0\rangle + a_1\,|1\rangle \quad \text{et} \quad |b\rangle = b_0\,|0\rangle + b_1\,|1\rangle$$

où les lettres a et b permettent d'identifier les états à un qubit, alors que les composantes avec des indices a_0 et a_1 (b_0 et b_1) peuvent facilement être associées aux bons états de base. Dans ce cas, les vecteurs d'état sont

$$|a\rangle = \begin{pmatrix}a_0\\a_1\end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |b\rangle = \begin{pmatrix}b_0\\b_1\end{pmatrix}.$$

A.3 Produit scalaire entre deux états

Maintenant que nous pouvons représenter des états quantiques par des vecteurs, nous pouvons les multiplier ensemble en utilisant le produit scalaire. Pourquoi voudrions-nous multiplier des états ensemble ? Le produit entre deux états nous permet, en quelque sorte, de comparer des états. Cela nous sera très utile par la suite.

En algèbre linéaire, on écrit le produit scalaire entre deux vecteurs $\mathbf{a}$ et $\mathbf{b}$ comme le produit entre le vecteur ligne $\mathbf{a}$ et le vecteur colonne $\mathbf{b}$

$$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = \begin{pmatrix}a_1 & a_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_1\\b_2\end{pmatrix} = a_1b_1 + a_2b_2.$$

Ce produit porte bien son nom, car il retourne un nombre, un scalaire. Dans le cas général où on a les deux états quantiques à 1 qubit

$$|a\rangle = a_0 |0\rangle + a_1 |1\rangle \qquad \text{et} \qquad |b\rangle = b_0 |0\rangle + b_1 |1\rangle ,$$

le produit entre ces deux états s'écrit

$$\langle a|b\rangle = \begin{pmatrix} a_0^* & a_1^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} = a_0^* b_0 + a_1^* b_1. \tag{1.4}$$

Info notation A.4 : Le bra

L'écriture $\langle \cdot |$ est appelée *bra*, l'alter ego du *ket*, et fait également partie de la notation de Dirac. On s'en sert également pour représenter un état quantique, mais son vecteur d'état prend alors la forme d'un vecteur ligne dont les composantes sont les complexes conjugués des composantes originales. Cette transformation s'appelle également le conjugué hermitien.

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \langle \psi | = \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \end{pmatrix}$$

Le produit entre deux états quantiques $\langle \cdot | \cdot \rangle$ est donc un *braket* !

Exemple A.1 : Produits scalaires entre les états de base

Illustrons le calcul de produits scalaires à partir des états de base. D'abord, le produit entre les vecteurs d'état des deux états de base donne

$$\langle 0|1\rangle = \begin{pmatrix} 1^* & 0^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

ce qui signifie que ces deux vecteurs d'état sont orthogonaux. On dit aussi que ces états quantiques sont orthogonaux. Ensuite, les produits de ces vecteurs d'état avec eux-mêmes donnent respectivement

$$\langle 0|0\rangle = \begin{pmatrix} 1^* & 0^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \quad \text{et} \, \langle 1|1\rangle = \begin{pmatrix} 0^* & 1^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1$$

nous informant que les vecteurs de base sont normalisés. On dit aussi que les états quantiques sont normalisés. En fait, pour qu'un état quantique en général soit valide, il doit être normalisé, comme on va le voir à la section A.4.

En particulier, le produit entre un état général et un état de base permet d'obtenir la composante devant cet état de base. Par exemple, avec $|0\rangle$

$$\langle 0|\psi\rangle = \langle 0| \left(\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle\right) = \alpha \langle 0|0\rangle + \beta \langle 1|0\rangle = \alpha$$

ou avec $|1\rangle$ en notation vectorielle

$$\langle 1|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0 \times \alpha + 1 \times \beta = \beta.$$

Exercice A.2 : Ordre du produit scalaire

Est-ce que les produits scalaires suivants

$$\langle a|b\rangle \quad \text{et} \quad \langle b|a\rangle$$

sont égaux ? Sinon, comment se comparent-ils ?

A.4 Normalisation d'un vecteur d'état

Les composantes d'un vecteur d'état d'un qubit ne sont pas complètement indépendantes. En effet, pour des raisons qui vont devenir plus claires à la section A.6, on exige qu'elles respectent la condition de *normalisation*

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \tag{1.5}$$

Par construction, les états de base sont des états normalisés. En effet,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |0\rangle & (\alpha = 1, \beta = 0) & & |1|^2 + |0|^2 &= 1 \\ |\psi\rangle &= |1\rangle & (\alpha = 0, \beta = 1) & & |0|^2 + |1|^2 &= 1. \end{aligned}$$

Exercice A.3 : Normalisation

Est-ce que ces états sont normalisés ?

a) $|\psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$

b) $|\psi_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$

c) $|\psi_c\rangle = \frac{1}{3}|0\rangle + \frac{2}{3}|1\rangle$

d) $|\psi_d\rangle = \sqrt{\frac{3}{4}}|0\rangle + \frac{1}{2}|1\rangle$

e) $|\psi_e\rangle = 0.9|1\rangle$

f) $|\psi_f\rangle = -|0\rangle$

On peut vérifier qu'un état est normalisé en calculant son produit scalaire avec lui-même. En effet pour un état $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ le produit scalaire est

$$\langle\psi|\psi\rangle = \alpha^*\alpha + \beta^*\beta = |\alpha|^2 + |\beta|^2.$$

Ainsi pour vérifier si un état quantique $|\psi\rangle$ est normalisé, on doit simplement vérifier que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Si ce n'est pas le cas, on peut créer une version normalisée du même état en renormalisant ses composantes

$$|\psi'\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}|\psi\rangle. \tag{1.6}$$

Exercice A.4 : Renormalisation

Démontrer que l'état de l'équation 1.6 est toujours normalisé, en autant que $\langle\psi|\psi\rangle \neq 0$.

A.5 Notion de base

Bien qu'on fera un usage limité de bases différentes de la base computationnelle dans ce texte, il est pertinent de donner une définition de ce qu'est une base et de fournir au moins un exemple supplémentaire. Pour un système à un qubit, une base est un ensemble de deux états $\{|u\rangle, |v\rangle\}$ qui sont mutuellement orthogonaux, c'est-à-dire que

$$\langle u|v\rangle = 0.$$

Ensuite ces vecteurs doivent être normés, c'est-à-dire que

$$\langle u|u\rangle = 1 \quad \text{et} \quad \langle v|v\rangle = 1.$$

On dit alors que $|u\rangle$ et $|v\rangle$ forment une base canonique.

Exemple A.2 : La base $|\pm\rangle$

Vérifions que les états

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \quad \text{et} \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

forment aussi une base pour un état à un qubit. D'abord, on peut écrire les vecteurs d'état dans la base computationnelle

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

Ensuite, on vérifie facilement que ces vecteurs sont normés

$$\langle +|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}^*}\begin{pmatrix}1^* & 1^*\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1+1) = 1$$
$$\langle -|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}^*}\begin{pmatrix}1^* & -1^*\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1+1) = 1$$

et orthogonaux

$$\langle -|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}^*}\begin{pmatrix}1^* & -1^*\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1-1) = 0.$$

Exemple A.3 : Changement de base

Soit un état quelconque exprimé dans la base computationnelle

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle\,,$$

quelles sont ses composantes, lorsqu'exprimées dans la base $|\pm\rangle$? Pour répondre à cette question, on peut d'abord exprimer les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ à l'aide des états $|+\rangle$ et $|-\rangle$. On peut facilement obtenir que

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

Et donc,

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) + \frac{\beta}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)\\ &= \frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}\,|+\rangle + \frac{\alpha-\beta}{\sqrt{2}}\,|-\rangle\,.\end{aligned}$$

Exercice A.5 : Vérification de base

a) Vérifiez que la base computationnelle $\{|0\rangle\,, |1\rangle\}$ est bien une base.

b) Vérifiez que les états

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

forment bien une base.

c) Exprimez l'état quelconque $|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle$ dans la base $\{|+i\rangle\,, |-i\rangle\}$.

A.6 Probabilités de mesure

Bien que l'état d'un qubit puisse être décrit grâce à son vecteur d'état, en pratique, cette information n'est pas vraiment accessible. La seule manière d'obtenir de l'information sur l'état d'un qubit est de le

mesurer. On ne peut pas assez insister sur l'importance de ce concept en mécanique quantique. La mesure est notre seule fenêtre sur l'étrange monde quantique.

Remarque

Dans le cadre de cette introduction au calcul quantique, on va considérer la mesure comme une opération ponctuelle dont le résultat dépend de l'état du qubit avant la mesure. En réalité, le processus de la mesure en mécanique quantique comprend son lot de complexités qui dépasse largement les objectifs de cette introduction.

Lorsqu'on mesure un qubit, seulement deux résultats sont possibles : 0 ou 1. Ces valeurs sont associées aux deux états de base $|0\rangle$ et $|1\rangle$. Un aspect important de la mesure d'un état quantique est que le résultat est aléatoire et impossible à prévoir. Cependant, la théorie de la mécanique quantique nous permet de déterminer très précisément les probabilités d'obtenir chacun des résultats possibles. Ces probabilités dépendent directement de l'état du qubit juste avant que la mesure soit prise.

On note les probabilités d'obtenir les résultats 0 et 1 respectivement p_0 et p_1. Pour un qubit dans un état général $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ces probabilités sont respectivement données par les modules au carré des amplitudes de probabilité α et β, c'est-à-dire

$$p_0 = |\alpha|^2 \quad \text{et} \quad p_1 = |\beta|^2.$$

C'est ce qu'on appelle, en mécanique quantique, la règle de Born, attribuée au physicien Max Born.

Comme ces probabilités sont égales à des modules au carré, elles sont garanties d'être réelles et positives. La somme des probabilités de tous les résultats possibles doit toujours être égale à 1. En d'autres mots, la probabilité d'obtenir un résultat (n'importe lequel) est toujours de 100%. Ainsi, les probabilités d'obtenir les résultats 0 et 1 doivent respecter l'égalité

$$p_0 + p_1 = 1$$

qui n'est rien d'autre que la condition de normalisation de l'équation 1.5 ! C'est ici que cette condition prend tout son sens. En effet, la condition de normalisation d'un état quantique s'assure que ses amplitudes de probabilité permettent bien de calculer les probabilités d'obtenir les différents résultats possibles.

Exemple A.4 : Probabilités de mesure pour l'état $|+\rangle$

Illustrons le calcul des probabilités d'obtenir les résultats 0 et 1 lors de la mesure d'un qubit dans l'état

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle.$$

La probabilité d'obtenir le résultat 0 est le module au carré de l'amplitude de probabilité devant l'état $|0\rangle$, c'est-à-dire

$$p_0 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}.$$

La mesure d'un qubit dans l'état $|+\rangle$ retournera le résultat 0 50% des fois. Similairement, la probabilité d'obtenir le résultat 1 est

$$p_1 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$$

et on a également 50% des chances d'obtenir 1. On vérifie du même coup que l'état $|+\rangle$ est bien un état normalisé.

Pour vérifier cela expérimentalement, on pourrait préparer 100 qubits, tous dans l'état $|+\rangle$, et les mesurer un à un. On pourrait aussi refaire la même expérience 100 fois avec le même qubit. Dans ces deux cas, on devrait alors obtenir le résultat 0 environ 50 des fois et le résultat 1 les autres fois.

Comme chaque résultat est aléatoire, il se peut que le nombre total de 0 obtenus ne soit pas exactement 50. Cependant, si on augmente le nombre de fois que l'on répète l'expérience, on augmentera nos chances d'obtenir un nombre de 0 proche du 50% théorique.

Exercice A.6 : Probabilités de mesure

a) Écrivez un état d'un qubit qui, lorsque mesuré, retourne le résultat 0 dans $\frac{1}{3}$ des cas et le résultat 1 dans $\frac{2}{3}$ des cas.

b) Écrivez un état d'un qubit qui, lorsque mesuré, retourne la valeur 0 avec une probabilité p et la valeur 1 avec une probabilité $1-p$.

c) Écrivez un autre état quantique, différent du précédent qui a les mêmes probabilités de retourner les valeurs 0 et 1 lorsqu'on le mesure.

À la section A.3, on a vu que le produit entre un état quantique et un des différents états de base permet d'extraire l'amplitude de probabilité associée à cet état de base. Cela nous permet donc d'utiliser le produit d'états quantiques pour calculer des probabilités de mesure. Par exemple, les probabilités d'obtenir 0 ou 1 lors de la mesure d'un qubit dans l'état $|\psi\rangle$ peuvent être écrites comme

$$p_0 = |\alpha|^2 = |\langle 0|\psi\rangle|^2 \qquad \text{et} \qquad p_1 = |\beta|^2 = |\langle 1|\psi\rangle|^2.$$

La forme générale d'une probabilité de mesure est donc la suivante : la probabilité d'obtenir un résultat de mesure associé à un état de base $|u\rangle$ alors que le qubit est dans l'état $|\psi\rangle$ est

$$p_u = |\langle u|\psi\rangle|^2 \tag{1.7}$$

qui peut également être exprimé comme

$$p_u = \langle u|\psi\rangle^* \langle u|\psi\rangle = \langle\psi|u\rangle\langle u|\psi\rangle\,.$$

A.7 Effet de la mesure

La mesure d'un système quantique comme un qubit est décidément assez différente de la notion de mesure qu'on entend habituellement (appelons-la mesure classique). D'abord, la mesure classique n'est pas un processus aléatoire : la mesure de plusieurs objets identiques résultera en des résultats similaires. Ensuite, la mesure classique n'influence pas l'état de l'objet mesuré. L'état d'un objet classique sera le même qu'on le mesure ou non.

Comme on vient de le voir, la mesure d'un système quantique retourne d'abord un résultat aléatoire. Seules les probabilités des différents résultats peuvent être calculées. Ensuite, le simple fait de mesurer un qubit modifiera irrémédiablement son état quantique : tout le contraire de la mesure classique ! En effet, l'état d'un qubit après sa mesure est l'état de base associé au résultat obtenu. On dit aussi que le qubit a été projeté dans l'état de base par la mesure.

Par exemple, si la mesure d'un qubit a retourné le résultat 0, le qubit est alors dans l'état $|0\rangle$. Toutes autres mesures subséquentes du même qubit retourneront encore l'état 0, à moins qu'on effectue d'autres opérations sur celui-ci entre temps.

Remarque

Parce que la mesure laisse le qubit dans l'état de base associé au résultat de mesure obtenu, on utilisera parfois la formulation suivante : « le qubit a été mesuré dans l'état $|u\rangle$ ». Cela signifie que le résultat de la mesure est celui associé à l'état de base $|u\rangle$ et que le qubit a été projeté dans cet état.

A.8 Phase globale

Considérons un état à un qubit quelconque $|\psi\rangle$ et une version légèrement différente

$$|\psi'\rangle = e^{i\theta}\,|\psi\rangle$$

à laquelle on a appliqué une phase θ. On peut d'abord s'assurer que $|\psi'\rangle$ est un état normalisé

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\,e^{-i\theta}e^{i\theta}\,|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

si l'état $|\psi\rangle$ est normalisé. Ensuite, comme notre seule manière d'observer ces états est de les mesurer, on peut se demander comment les résultats diffèrent pour ces deux états. On peut utiliser l'équation 1.7 pour exprimer de manière générale la probabilité de mesurer les états $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ dans l'état de base $|u\rangle$. On obtient,

$$p'_u = |\langle u|\psi'\rangle|^2 = e^{-i\theta}\,\langle\psi|u\rangle\, e^{i\theta}\,\langle u|\psi\rangle = p_u.$$

Les probabilités de mesure sont donc identiques pour les deux états, peu importe la phase θ. Autrement dit, il est impossible de distinguer les états $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$. La phase θ est appelée la phase globale et $e^{i\theta}$, le facteur de phase globale. La phase globale n'a aucune conséquence physique et peut donc toujours être ignorée sans que cela ne change les prédictions physiques.

A.9 Phase relative

En revanche, une phase relative peut avoir des conséquences physiques et ne peut généralement pas être ignorée. Une phase relative est une phase entre différentes composantes d'un état quantique. Considérons les deux états suivants

$$|\psi\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle \quad \text{et} \quad |\psi'\rangle = a\,|0\rangle + e^{i\varphi}b\,|1\rangle$$

qui diffèrent par une phase relative φ et supposons que a et b sont réels par souci de simplicité. La probabilité de mesurer le premier état dans l'état $|u\rangle$ est

$$p_u = a^2|\langle u|0\rangle|^2 + b^2|\langle u|1\rangle|^2 + ab(\langle 0|u\rangle\langle u|1\rangle + \langle 1|u\rangle\langle u|0\rangle) \tag{1.8}$$

alors que pour le second

$$p'_u = a^2|\langle u|0\rangle|^2 + b^2|\langle u|1\rangle|^2 + ab\big(e^{i\varphi}\,\langle 0|u\rangle\langle u|1\rangle + e^{-i\varphi}\,\langle 1|u\rangle\langle u|0\rangle\big). \tag{1.9}$$

On voit que dans ce second cas, le résultat dépend directement de la phase φ. Deux états quantiques qui diffèrent uniquement par une phase relative peuvent donc produire des résultats de mesure différents et il est possible de les distinguer. Une phase relative a donc des conséquences physiques et ne peut pas simplement être ignorée.

Exemple A.5 : Phase globale et phase relative

Illustrons les concepts de phase globale et de phase relative grâce à un exemple. Considérons l'état quantique suivant

$$|\psi\rangle = e^{i\theta}\big(a_0e^{i\varphi_0}\,|0\rangle + a_1e^{i\varphi_1}\,|1\rangle\big)$$

où a_0, a_1, φ_0, φ_1 et θ sont réels. Si on distribue la phase globale θ on peut écrire le même état comme

$$|\psi\rangle = a_0e^{i(\theta+\varphi_0)}\,|0\rangle + a_1e^{i(\theta+\varphi_1)}\,|1\rangle\,.$$

Dans tous les cas, la phase relative peut être calculée en effectuant le ratio des amplitudes complexes devant les états $|1\rangle$ et $|0\rangle$. La phase relative est alors la phase du nombre complexe obtenu. Dans le cas présent, la phase relative est obtenue grâce à

$$\frac{a_1e^{i(\theta+\varphi_1)}}{a_0e^{i(\theta+\varphi_0)}} = \frac{a_1}{a_0}e^{i((\theta+\varphi_1)-(\theta+\varphi_0))} = \frac{a_1}{a_0}e^{i(\varphi_1-\varphi_0)}.$$

La phase relative peut donc être identifiée comme étant $\varphi_1-\varphi_0$. Remarquez qu'on aurait obtenu le même résultat pour les états quantiques suivants

$$|\psi'\rangle = a_0e^{i\varphi_0}\,|0\rangle + a_1e^{i\varphi_1}\,|1\rangle \quad \text{et} \quad |\psi''\rangle = a_0\,|0\rangle + a_1e^{i(\varphi_1-\varphi_0)}\,|1\rangle$$

qui ne diffèrent les uns des autres que par des phases globales.

Exercice A.7 : Phase relative

a) Obtenez d'abord les expressions des équations 1.8 et 1.9.

b) Ensuite, en utilisant une forme polaire pour

$$\langle 0|u\rangle\langle u|1\rangle = e^{i\delta}|\langle 0|u\rangle\langle u|1\rangle|$$

montrez que

$$p_u = a^2|\langle u|0\rangle|^2 + b^2|\langle u|1\rangle|^2 + 2ab\cos(\delta)|\langle 0|u\rangle\langle u|1\rangle|$$

et

$$p'_u = a^2|\langle u|0\rangle|^2 + b^2|\langle u|1\rangle|^2 + 2ab\cos(\varphi+\delta)|\langle 0|u\rangle\langle u|1\rangle|.$$

c) Pouvez-vous identifier au moins un cas où la phase relative φ n'aura pas de conséquence physique.

A.10 Sphère de Bloch

La sphère de Bloch est un outil de visualisation d'un état à un qubit. Dans la plupart des ouvrages sur la mécanique quantique, elle est simplement décrite. Nous allons plutôt tenter de construire la sphère de Bloch à partir de ce que l'on sait des états quantiques à un qubit en espérant que cela nous ouvre une compréhension plus profonde de son utilisation.

La construction de la sphère de Bloch s'appuie sur le fait que l'état d'un qubit peut être écrit comme une combinaison linéaire de deux états de base

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

où les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ forment une base, c'est-à-dire qu'ils sont normés et mutuellement orthogonaux

$$\langle 0|0\rangle = 1 \qquad \langle 1|1\rangle = 1 \qquad \langle 0|1\rangle = 0.$$

Le *cercle* de Bloch

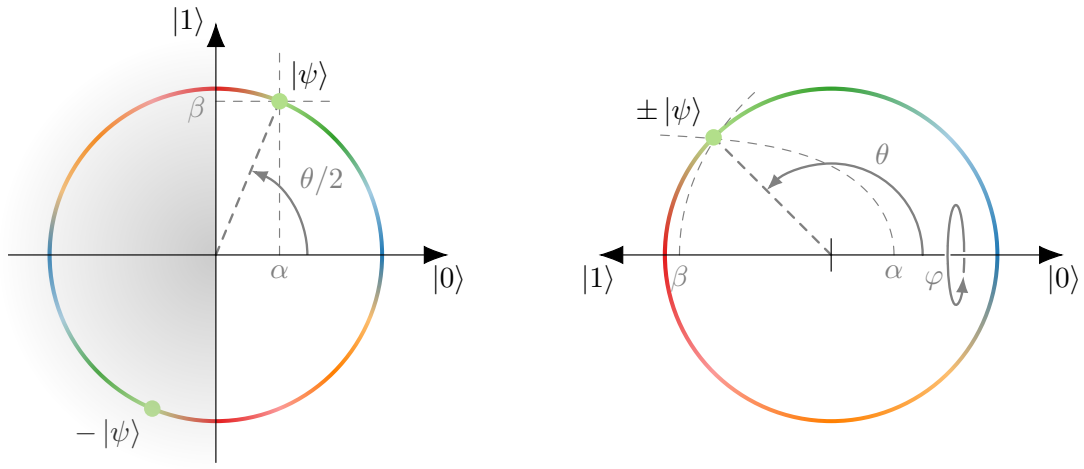
Considérons d'abord uniquement les états quantiques avec des composantes réelles, et ce, jusqu'à la fin de cette section. Ceux-ci vivent dans un espace à deux dimensions qu'on pourra facilement illustrer. La première direction de l'espace (l'axe horizontal) sera attribuée à $|0\rangle$ avec la composante α. La seconde direction (l'axe vertical) sera attribuée à $|1\rangle$ avec la composante β.

Comme ces composantes doivent respecter la condition de normalisation (équation 1.5), les états quantiques valides doivent se retrouver sur un cercle de rayon unité comme cela est illustré à la figure 1.1a. Les états de base $|0\rangle$ et $|1\rangle$ se situent alors aux intersections entre ce cercle et les axes.

Un état quelconque $|\psi\rangle$ se retrouve donc quelque part sur ce cercle, alors qu'un état $-|\psi\rangle$ se retrouve du côté diamétralement opposé du même cercle. Or, comme on a vu à la section A.8 un facteur de phase global (ici $e^{i\pi} = -1$) n'a pas de conséquence physique observable. Utilisons un code de couleurs pour illustrer que les états $|\psi\rangle$ et $-|\psi\rangle$ sont physiquement indistinguables : deux états identifiés par la même couleur sur le cercle mèneront aux mêmes observations expérimentales.

L'espace illustré à la figure 1.1a est en quelque sorte deux fois trop grand ; on pourrait se débarrasser de la moitié cet espace sans perte de généralité. Imaginons donc que l'on coupe ce cercle à deux endroits (en $\pm|1\rangle$) ; que l'on se débarrasse de sa moitié gauche de la figure 1.1a ; et que l'on rejoigne les deux bouts de l'arc restant. On obtiendrait alors une construction telle qu'illustrée à la figure 1.1b que l'on appellera temporairement le *cercle* de Bloch.

Remarquez comment, sur la figure 1.1b, chaque couleur n'apparait alors qu'une seule fois et comment les états de base $|0\rangle$ et $|1\rangle$ sont maintenant opposés l'un à l'autre. Le code de couleur nous permet également d'identifier la position de l'état $|\psi\rangle$. Notez qu'on aurait pu faire la même construction en gardant la moitié



(a) (b)

FIGURE 1.1 – Construction du *cercle* de Bloch.

gauche de la figure 1.1a. Pour cette raison, on voit que les états $|\psi\rangle$ et $-|\psi\rangle$ tombent exactement l'un sur l'autre sur la figure 1.1b. Nous avons donc éliminé la redondance dans cet espace et il est alors possible d'identifier un état quantique physique $|\psi\rangle$ à l'aide d'une seule coordonnée : l'angle θ entre celui-ci et l'état $|0\rangle$. Remarquez que l'angle entre les états $|\psi\rangle$ et $|0\rangle$ sur la figure 1.1a est notée $\theta/2$.

La sphère de Bloch

Constatons maintenant que les états quantiques dont les composantes α et β sont du même signe (les deux positifs ou les deux négatifs) se retrouvent dans la partie supérieure de la figure 1.1b, et que les états avec des composantes de signes opposés, dans la partie inférieure. Ce qui distingue ces deux groupes d'états quantiques est donc la phase relative φ entre α et β.

Lorsqu'on se limite à des composantes réelles, la phase relative ne peut prendre que les valeurs 0 et π pour des facteurs de phase de $e^{i0} = 1$ ou $e^{i\pi} = -1$. Lorsqu'on permet des composantes complexes, ce facteur de phase peut prendre toutes les valeurs $e^{i\varphi}$ avec φ compris entre 0 et 2π. L'angle φ nous permet donc de faire le tour de l'axe qui relie les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ en sortant du plan de la figure. La révolution du *cercle* de Bloch autour de cet axe produit une sphère appelée la sphère de Bloch.

La figure 1.2 illustre une représentation typique de la sphère de Bloch. L'axe des z étant l'axe qui passe par les états de base $|0\rangle$ (au pôle Nord) et $|1\rangle$ (au pôle Sud). De manière analogue au système de coordonnées géographiques, l'angle θ permet de changer de latitude et l'angle ϕ de longitude. Le tableau 1.1 dresse également la liste des correspondances entre le cercle et la sphère de Bloch.

Remarque

Un fait intéressant à noter, et qui est parfois source de confusion, est que bien que les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ apparaissent comme *colinéaires* sur la sphère de Bloch, ils sont bien orthogonaux ! En effet, on doit se reporter à la figure 1.1a pour se convaincre qu'ils sont orthogonaux, même si la représentation en sphère de Bloch semble illustrer le contraire.

État quantique général d'un qubit

On voit donc que tous les états quantiques physiques possibles d'un qubit se retrouvent à la surface de la sphère de Bloch. Chacun d'eux peut être entièrement décrit par seulement deux paramètres θ et φ. Terminons cette section en écrivant l'état quantique à l'aide de ces deux paramètres.

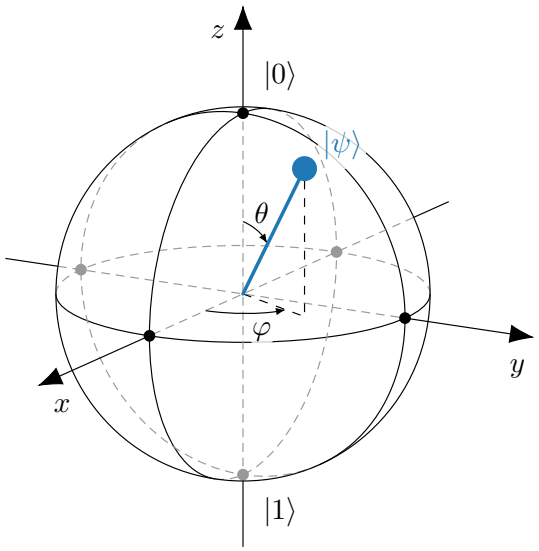


FIGURE 1.2 – La sphère de Bloch et la position d'un état $|\psi\rangle$ à sa surface en fonction des angles θ et φ.

Figure 1.1b	Figure 1.2
Axe horizontal	Axe des z
Axe vertical	Axe des x
Hors du plan	Axe des y

TABLE 1.1 – Liste de correspondances entre le cercle et la sphère de Bloch.

Si on revient à la figure 1.1a, il est clair que pour un état quantique aux composantes réelles on peut écrire l'état quantique

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)\,|0\rangle + \sin(\theta/2)\,|1\rangle \qquad \text{(Composantes réelles)}$$

avec θ compris entre 0 et 2π. Les états pour $\theta \in [0, \pi]$ correspondent aux états avec un facteur de phase relatif $+1$ et, les états pour $\theta \in [\pi, 2\pi]$, un facteur de phase relatif -1.

Pour obtenir la forme d'un état quantique aux composantes complexes, il ne reste qu'à inclure un facteur de phase relative complexe en écrivant

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)\,|0\rangle + e^{i\varphi}\sin(\theta/2)\,|1\rangle \tag{1.10}$$

où θ est alors limité entre 0 et π car la phase relative permet déjà de visiter l'autre côté de la sphère.

A.11 États quantiques notables (à un qubit)

Il est parfois pratique d'établir une liste d'états quantiques qui reviennent souvent dans le cadre du calcul et de la programmation quantique. Dans le cas des états à un qubit, on identifie les états sur la sphère de Bloch qui croisent les axes dans les trois directions. La figure 1.3 permet d'illustrer les positions de ces états sur la sphère de Bloch.

Ainsi, les états qui se trouvent sur l'axe des z sont les états de base $|0\rangle$ et $|1\rangle$ que nous connaissons déjà. Les états qui se trouvent sur l'axe des x sont notés $|+\rangle$ et $|-\rangle$. On peut exprimer ceux-ci en fonction des états de base comme étant

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

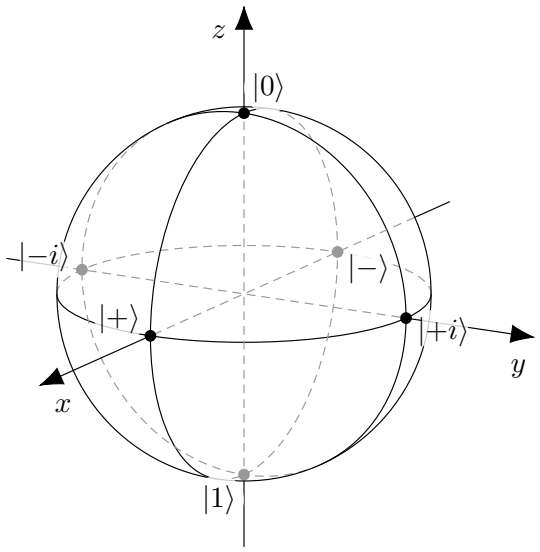


FIGURE 1.3 – Positions d'états quantiques notables sur la sphère de Bloch.

Finalement, les états qui se trouvent sur l'axe des y sont notés $|+i\rangle$ et $|-i\rangle$ (également parfois notés $|\mathrm{R}\rangle$ et $|\mathrm{L}\rangle$ ou encore $|\circlearrowleft\rangle$ et $|\circlearrowright\rangle$). Leurs expressions en fonction des états de base sont quant à elles

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

Exercice A.8 : États spéciaux sur la sphère de Bloch

Vérifiez que les états $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|\pm\rangle$ et $|\pm i\rangle$ se trouvent bien aux endroits identifiés sur la figure 1.3 en utilisant l'équation 1.10 et en déterminant les angles θ et φ pour chacun d'eux.

Remarque

Notez que comme la paire d'états $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, les paires $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ et $\{|+i\rangle, |-i\rangle\}$ peuvent également être utilisées comme bases des états à un qubit. En d'autres mots, n'importe quel état à un qubit peut être exprimé comme une combinaison linéaire des états $|+\rangle$ et $|-\rangle$, ou comme une combinaison linéaire des états $|+i\rangle$ et $|-i\rangle$. C'est-à-dire

$$|\psi\rangle = \alpha'\,|+\rangle + \beta'\,|-\rangle \quad \text{ou} \quad |\psi\rangle = \alpha''\,|+i\rangle + \beta''\,|-i\rangle\,.$$

Cela est possible, car les états de $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ et $\{|+i\rangle, |-i\rangle\}$ sont normalisés et mutuellement orthogonaux.

A.12 Arrière-scène quantique

Nous avons maintenant en main tous les outils pour décrire l'état quantique d'un qubit. Nous avons également vu aux sections A.6 et A.7 comment on acquiert de l'information sur cet état à l'aide de la mesure. Prenons un pas de recul pour décrire comment ces deux aspects vont entrer en interaction.

Comme nous allons le voir, la théorie de la mécanique quantique va permettre de décrire de manière déterministe comment l'état d'un qubit évolue en fonction des différentes opérations qu'on va lui appliquer. Par déterministe, on entend que pour un état quantique de départ donné et une série d'opérations données (excluant la mesure), l'état quantique final sera parfaitement déterminé. Cependant, le résultat de la mesure sur cet état final lui n'est pas déterministe, mais probabiliste et impossible à prévoir.

C'est comme s'il y avait une avant-scène et une arrière-scène à la réalité. L'arrière-scène est régie par la mécanique quantique. Les phénomènes étranges de la mécanique quantique telle que la superposition, l'intrication (que l'on va voir au chapitre 2) et l'interférence sont possibles dans l'arrière-scène. Tout ce qui s'y passe évolue de manière déterministe et prévisible, mais reste inaccessible à un observateur.

En contrepartie, l'avant-scène est une manifestation, par l'intermédiaire de la mesure, de ce qui se passe en arrière-scène. Ainsi, aussitôt qu'on mesure un système dans un état quantique quelconque, il apparait à l'avant-scène. L'état dans lequel il apparait est aléatoire et les différents résultats possibles ont des probabilités de survenir qui dépendent de l'état qu'avait le système dans l'arrière-scène. L'avant-scène correspond donc plutôt à notre monde habituel classique où les choses se comportent de manière « normale », c'est-à-dire que les phénomènes de superposition, d'intrication et d'interférence ne peuvent pas survivre à l'avant-scène.

Pour un qubit, par exemple, toute la sphère de Bloch est accessible tant qu'il reste à l'arrière-scène. Cependant quand il est à l'avant-scène, il ne peut être que dans les états $|0\rangle$ ou $|1\rangle$.

Exercice A.9 : Retour à l'arrière scène

Lorsqu'on mesure un qubit, son état est projeté dans un des deux états de base. Que se passe-t-il si on tente de modifier l'état du qubit après cette mesure ? Vous pouvez utiliser l'analogie de l'avant et de l'arrière scène pour illustrer votre propos.

B Portes quantiques à un qubit

La première section de ce chapitre nous a permis d'introduire les outils mathématiques pour décrire l'état d'un qubit. Dans la présente section, on s'intéresse aux outils qui nous permettront de modifier l'état d'un qubit pour ainsi commencer à effectuer des calculs quantiques. Dans le cadre du calcul quantique, les opérations qui modifient l'état d'un ou de plusieurs qubits sont appelées des portes quantiques. Cette section introduit donc les portes quantiques qui s'appliquent à un seul qubit.

B.1 Application d'une porte quantique

Pour modifier l'état d'un qubit, on lui applique une porte quantique. L'application d'une porte $\hat{P}$ sur un état $|\psi\rangle$ produit un nouvel état $|\psi'\rangle$. On exprime cette opération ainsi

$$|\psi'\rangle = \hat{P}\,|\psi\rangle\,.$$

Info notation B.1 : Des chapeaux

On utilise le chapeau $\hat{\cdot}$ pour distinguer les portes quantiques des simples scalaires. En fait, on va vite voir que cette notation sera utilisée pour les portes, les opérateurs et les observables. Dans les présentes notes et par soucis esthétiques, on omet le chapeau lorsqu'on identifie une porte dans un circuit quantique, comme à la figure 1.4a.

B.2 Diagramme

On va éventuellement vouloir illustrer l'application de plusieurs portes quantiques sur un ensemble de plusieurs qubits. On appelle un circuit quantique une représentation diagrammatique de cette série d'opérations. En particulier, on représente une porte quantique à un qubit par un diagramme comme celui illustré à la figure 1.4a où la porte est représentée par une boite qui recouvre une ligne horizontale associée au qubit sur lequel elle agit. La ligne horizontale permet de suivre l'évolution de l'état d'un qubit où l'état initial se trouve du côté gauche de la porte et l'état final du côté droit. Par convention, certaines portes quantiques sont représentées par des diagrammes différents.

La mesure d'un qubit est représentée par le diagramme illustré à la figure 1.4d. Notez que la mesure n'est pas une opération quantique, car elle n'est pas réversible. C'est pour cette raison qu'en règle générale, la mesure est la dernière opération effectuée sur un qubit.

B.3 Représentation matricielle

On a vu, à la section A.2, que l'état quantique d'un qubit peut être décrit grâce à un vecteur à deux composantes complexes. Que pourrait-on utiliser pour décrire l'effet d'une porte quantique ? En d'autres

(a) Porte $\hat{P}$ (b) Porte NOT (c) Porte $\hat{I}$ (d) Mesure

FIGURE 1.4 – Diagrammes représentant différentes portes quantiques à un qubit (a-c) ainsi que la mesure (d). Ces représentations seront utilisées pour construire des circuits quantiques.

termes, que peut-on utiliser pour transformer un vecteur à deux composantes en un autre vecteur à deux composantes ? Une matrice !

Alors qu'on peut écrire l'état d'un qubit comme un vecteur à deux composantes, on peut également écrire l'effet d'une porte sous la forme d'une matrice 2×2. Écrivons la forme générale d'une telle matrice

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} P_{00} & P_{01} \\ P_{10} & P_{11} \end{pmatrix}$$

où les éléments de matrice P_{ij} peuvent également être des nombres complexes.

Info notation B.2 : Les indices

Puisqu'on fera une utilisation intensive des vecteurs, des matrices et des tenseurs, nous serons amenés tôt ou tard à utiliser la notation indicielle. Cette notation permet de faire référence de manière abstraite à un élément d'un vecteur (composante), d'une matrice ou d'un tenseur. Par exemple, lorsqu'on écrit P_{ij} on fait référence à l'élément de la matrice P qui se situe à la ligne i et à la colonne j.

Info notation B.3 : Numérotation à partir de 0

Dans de nombreux cas, nous allons numéroter les indices à partir de 0 et non à partir de 1. Cela permet, entre autres, d'être cohérent avec la plupart des langages de programmation ainsi qu'avec la représentation binaire des entiers.

Info notation B.4 : Portes quantiques et matrices

Comme pour les états quantiques et les vecteurs d'état (voir équation 1.3), l'égalité entre une porte quantique et une matrice

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} P_{00} & P_{01} \\ P_{10} & P_{11} \end{pmatrix} \tag{1.11}$$

est un abus de notation. La raison pour laquelle cela n'est pas rigoureusement vrai est encore une question de base : une porte quantique pourrait être décrite par une autre matrice si on l'exprimait dans une base différente.

Encore une fois, à moins d'avis contraire, une égalité telle que celle de l'équation 1.11 suppose que la porte quantique est exprimée dans la base computationnelle $\{|0\rangle, |1\rangle\}$.

B.4 Effet d'une porte quantique

L'état quantique résultant de l'application d'une porte quantique sur un état quantique initial s'obtient en effectuant le produit de la matrice représentant la porte avec le vecteur d'état représentant l'état quantique. Le résultat de ce produit est un nouveau vecteur qui représente l'état quantique du qubit après l'application de la porte

$$|\psi'\rangle = \hat{P}\,|\psi\rangle = \begin{pmatrix} P_{00} & P_{01} \\ P_{10} & P_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{00}\alpha + P_{01}\beta \\ P_{10}\alpha + P_{11}\beta \end{pmatrix}. \tag{1.12}$$

Exemple B.1 : La porte $\hat{X}$

Une porte très utile en calcul quantique est la porte $\hat{X}$ aussi appelé porte NOT (non). Elle a l'effet de transformer l'un des états de base ($|0\rangle$ ou $|1\rangle$) en son état opposé, c'est-à-dire

$$|1\rangle = \hat{X}\,|0\rangle \quad \text{et} \quad |0\rangle = \hat{X}\,|1\rangle\,.$$

Tentons de déduire la représentation matricielle de la porte $\hat{X}$: quels sont ses éléments de matrice ? D'abord, la première équation nous permet de déterminer la première colonne de $\hat{X}$. En effet,

$$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}X_{00} & X_{01}\\ X_{10} & X_{11}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}X_{00}\\X_{10}\end{pmatrix}.$$

De la même manière, la seconde équation permet de déduire la seconde colonne de $\hat{X}$,

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & X_{01}\\ 1 & X_{11}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}X_{01}\\X_{11}\end{pmatrix}$$

et donc la matrice qui représente la porte $\hat{X}$ est

$$\hat{X} = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}.$$

Exercice B.1 : Deux portes $\hat{X}$

Montrez que l'application de deux portes $\hat{X}$ successives permet de revenir à l'état initial peu importe cet état initial.

B.5 Composition de portes quantiques

L'application de plusieurs portes successives (ou composition) peut être résumée par le produit des matrices représentant les différentes portes. Par exemple, les applications successives des portes $\hat{P}_1$ et $\hat{P}_2$ à la figure 1.5a peuvent être remplacées par l'application d'une seule porte $\hat{P}_3$ à la figure 1.5b.

Illustrons cela mathématiquement en appliquant d'abord une porte $\hat{P}_1$ sur un état initial $|\psi\rangle$. On obtient ainsi un nouvel état quantique intermédiaire

$$|\psi'\rangle = \hat{P}_1\,|\psi\rangle\,.$$

Appliquons ensuite une seconde porte $\hat{P}_2$ sur cet état pour obtenir l'état final

$$|\psi''\rangle = \hat{P}_2\,|\psi'\rangle\,.$$

En combinant ces applications successives, on constate que l'état final peut être obtenu directement à partir de l'état initial

$$|\psi''\rangle = \hat{P}_2\hat{P}_1\,|\psi\rangle\,.$$

en appliquant la porte combinée $\hat{P}_2\hat{P}_1$. Notez que la porte $\hat{P}_1$ s'applique en premier et se trouve donc à droite du produit, plus proche de l'état initial. Comme $\hat{P}_1$ et $\hat{P}_2$ sont des matrices, on peut construire une nouvelle porte $\hat{P}_3$ en effectuant le produit matriciel de celles-ci

$$\hat{P}_3 = \hat{P}_2\hat{P}_1$$

de sorte que

$$|\psi''\rangle = \hat{P}_3\,|\psi\rangle\,.$$

L'effet de plusieurs portes quantiques successives peut donc toujours être résumé à l'application d'une seule porte quantique.

(a) Deux portes quantiques successives (b) La porte quantique équivalente

FIGURE 1.5 – L'application successive de deux portes quantiques (a) est équivalente à l'application d'une seule porte quantique (b).

B.6 Transformation d'un $\langle\cdot|$

Nous avons vu à la section B.4 comment une porte transforme un état écrit sous la forme d'un $|\cdot\rangle$. Nous avons également vu, à la section A.3, qu'un état peut être représenté sous la forme d'un $\langle\cdot|$. On peut donc se demander comment écrire l'application d'une porte quantique sur un $\langle\cdot|$.

On sait que $\langle\cdot|$ est le conjugué hermitien (transposé et conjugué complexe) de $|\cdot\rangle$. Écrivons donc une version conjuguée hermitienne de l'équation 1.12 en se rappelant que la transposée d'un produit inverse l'ordre des facteurs

$$\langle\psi'| = \begin{pmatrix}\alpha^* & \beta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}P_{00}^* & P_{10}^* \\ P_{01}^* & P_{11}^*\end{pmatrix} = \langle\psi|\,\hat{P}^\dagger \tag{1.13}$$

où

$$\hat{P}^\dagger = (\hat{P}^\intercal)^* = (\hat{P}^*)^\intercal \tag{1.14}$$

est la matrice conjuguée hermitienne de $\hat{P}$. On voit que l'application d'une porte quantique sur un $\langle\cdot|$ s'effectue par la droite et en utilisant la conjuguée hermitienne de la matrice qui représente la porte quantique.

Donc pour une transformation $\hat{P}$ d'un $|\cdot\rangle$, le $\langle\cdot|$ se transforme grâce à $\hat{P}^\dagger$

$$|\psi'\rangle = \hat{P}\,|\psi\rangle \qquad\qquad \langle\psi'| = \langle\psi|\,\hat{P}^\dagger.$$

Exercice B.2 : Conjuguée hermitien

Exprimez les matrices conjuguées hermitiennes pour les trois matrices suivantes

$$\hat{Y} = \begin{pmatrix}0 & -i \\ i & 0\end{pmatrix} \qquad \hat{S} = \begin{pmatrix}1 & 0 \\ 0 & i\end{pmatrix} \qquad \hat{X} = \begin{pmatrix}0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix}.$$

B.7 Transformation d'états quantiques normalisés

Si l'état $|\psi\rangle$ est normalisé, on doit également exiger que l'état résultant d'une transformation $|\psi'\rangle = \hat{P}\,|\psi\rangle$ le soit aussi. C'est-à-dire que

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad \text{et} \quad \langle\psi'|\psi'\rangle = 1.$$

Explicitement, on exige l'égalité suivante,

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{P}^\dagger\hat{P}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

ce qui est vérifié si $\hat{P}^\dagger\hat{P}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$. Cela implique que le produit $\hat{P}^\dagger\hat{P} = \hat{I}$ où $\hat{I}$ est la matrice identité. Cela implique également que l'inverse de $\hat{P}$ est donné par sa conjuguée hermitienne

$$\hat{P}^{-1} = \hat{P}^\dagger \tag{1.15}$$

Finalement, on voit que la matrice $\hat{P}$ respecte l'identité suivante

$$\hat{P}^\dagger\hat{P} = \hat{P}\hat{P}^\dagger = \hat{I} \tag{1.16}$$

qui n'est rien d'autre que la définition d'une matrice unitaire. Notons que le déterminant d'une matrice unitaire est un nombre complexe de module 1. La matrice qui représente une porte quantique respecte toujours

$$|\det(\hat{P})| = 1. \tag{1.17}$$

Soulignons cependant que cette propriété n'est pas suffisante pour qu'une matrice soit unitaire.

Exemple B.2 : Matrice unitaire

Montrons que la matrice qui représente la porte

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

est bien unitaire. On effectue donc le produit de cette matrice avec sa conjuguée hermitienne

$$\hat{Y}^\dagger \hat{Y} = \begin{pmatrix} 0 & (i)^* \\ (-i)^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

On obtient donc bien la matrice identité. La matrice $\hat{Y}$ est donc unitaire et peut être utilisée comme une porte quantique.

Exemple B.3 : Matrice non-unitaire

En contrepartie, la matrice

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

n'est pas unitaire. En effet,

$$\hat{M}^\dagger \hat{M} = \begin{pmatrix} 1^* & 1^* \\ 1* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \neq \hat{I}.$$

La matrice $\hat{M}$ n'est donc pas unitaire malgré que son déterminant respecte

$$|\det(\hat{M})| = 1.$$

B.8 Propriétés des portes quantiques

Comme les portes quantiques peuvent être représentées par des matrices unitaires, elles partagent les mêmes propriétés que ces matrices. Tentons d'en dresser une liste utile.

Non abélienne

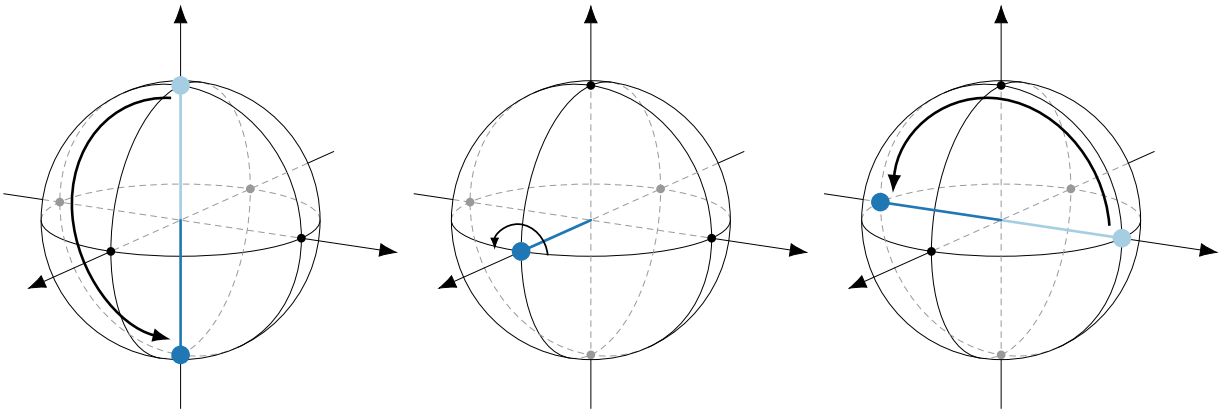
Comme pour le produit de matrices, l'ordre d'application des portes quantiques est important : elles sont non abéliennes ou non commutatives. À priori, l'application de deux portes quantiques dans un ordre et dans l'autre ne produira pas le même résultat

$$\hat{P}_2 \hat{P}_1 \neq \hat{P}_1 \hat{P}_2.$$

Bien qu'il existe des exceptions où des portes quantiques commutent, en général ce n'est pas le cas.

Unitaire

Une matrice unitaire est toujours inversible. Les portes quantiques sont également inversibles. Dans un calcul quantique, il existe toujours une opération qui nous permet de revenir en arrière, tant qu'on n'a pas effectué de mesure évidemment.



(a) (b) (c)

FIGURE 1.6 – Exemples des trajectoires pour les transformations de différents états initiaux avec la porte $\hat{X}$. Ces trajectoires sont générées par une rotation de 180° autour de l'axe x. Par exemple, la porte $\hat{X}$ transforme (a) l'état $|0\rangle$ en $|1\rangle$, (b) laisse l'état $|+\rangle$ inchangé et (c) l'état $|+i\rangle$ en $|-i\rangle$

De plus, la matrice inverse (porte inverse) d'une matrice unitaire (porte quantique) est très facile à obtenir : on doit simplement prendre le conjugué hermitien (voir les équations 1.14 et 1.15) c'est-à-dire prendre la transposée et le conjugué complexe. Dans le cas d'une suite de portes quantiques, on ne doit pas oublier d'inverser l'ordre des opérations lorsqu'on prend la matrice transposée.

B.9 Quelques portes quantiques à un qubit

Bien qu'on puisse construire une infinité de portes quantiques à un qubit différentes, certaines portes sont utilisées plus souvent que d'autres. Ces portes peuvent également servir de base afin de définir d'autres portes. Dans cette section, on dresse la liste de quelques portes quantiques importantes. On verra aussi que chacune des portes quantiques peut être vue comme une rotation sur la sphère de Bloch (section A.10). On donnera donc quelques exemples de trajectoires pour illustrer la transformation de quelques états quantiques par ces portes.

Porte $\hat{X}$

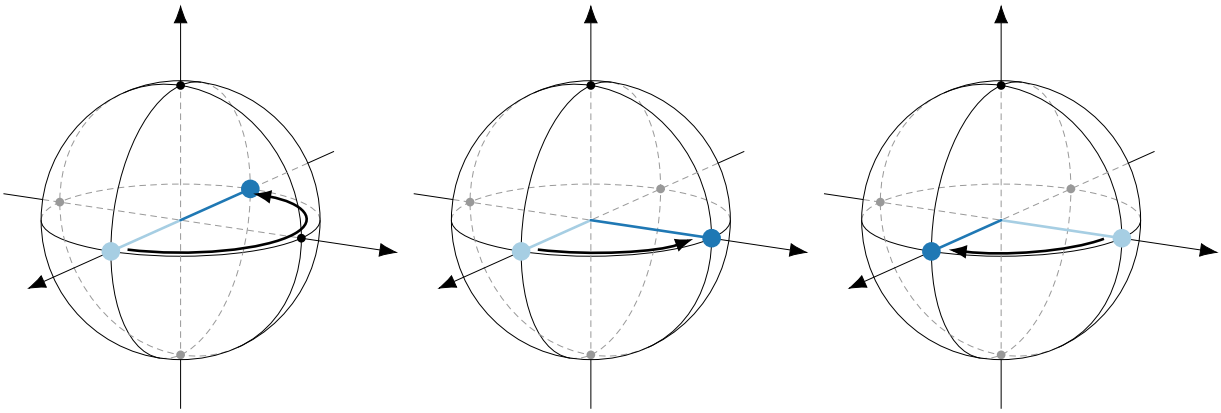
Nous avons déjà introduit la porte $\hat{X}$ (aussi appelée porte NOT) à l'exemple B.1. Cette porte a pour effet de transformer un état de base à un qubit ($|0\rangle$ ou $|1\rangle$) en l'état de base opposé. L'effet de la porte $\hat{X}$ est équivalent à une rotation d'un demi-tour (π rad) autour de l'axe des x. La matrice qui représente cette transformation est

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

La figure 1.6 illustre comment la porte $\hat{X}$ transforme les états $|0\rangle$, $|+\rangle$ et $|+i\rangle$. Cette porte est sa propre inverse

$$\hat{X}^\dagger = \hat{X}$$

c'est-à-dire que si on l'applique deux fois de suite, on retrouve l'état initial du qubit.



(a) (b) (c)

FIGURE 1.7 – Exemples des trajectoires pour les transformations de différents états initiaux avec les portes de phase (a) $\hat{Z}$, (b) $\hat{S}$ et (c) $\hat{S}^\dagger$.

Exercice B.3 : La porte $\hat{X}$

a) Quel est l'effet de la porte $\hat{X}$ sur un état général ?

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle$$

b) Identifiez les composantes α et β d'un état qui reste inchangé sous l'effet de cette porte. Assurez-vous que cet état soit normalisé.

$$\hat{X}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

c) Identifiez les composantes α et β d'un état qui change de signe sous l'effet de cette porte.

$$\hat{X}\,|\psi\rangle = -\,|\psi\rangle$$

d) Démontrez que la porte $\hat{X}$ est sa propre inverse.

Porte $\hat{Z}$

Analogue à la porte $\hat{X}$, la porte $\hat{Z}$ effectue une rotation d'un demi-tour, mais cette fois, autour de l'axe des z comme illustré à la figure 1.7a. La rotation autour de l'axe des z se résume à un changement de la phase φ (voir la figure 1.2). Une rotation de π rad autour de l'axe des z engendre un facteur de phase relatif de $e^{i\pi} = -1$. La matrice qui représente cette transformation est donc

$$\hat{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

La porte $\hat{Z}$ prend aussi le nom de porte d'inversion de phase. Cette porte est également sa propre inverse.

Porte $\hat{Y}$

La porte $\hat{Y}$ agit également de manière analogue aux portes $\hat{X}$ et $\hat{Z}$ mais, cette fois-ci, autour de l'axe des y. La matrice qui représente cette porte quantique est

$$\hat{Y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Comme les portes $\hat{X}$ et $\hat{Z}$, cette porte est également sa propre inverse.

Remarque : Matrices de Pauli

Les matrices qui représentent les portes $\hat{X}$, $\hat{Z}$ et $\hat{Y}$ correspondent aussi aux trois matrices de Pauli.

Exercice B.4 : Les portes de Pauli

Les portes $\hat{X}$, $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$ sont représentées par les trois matrices de Pauli.

a) Montrez que ces trois portes quantiques sont bien unitaires.

b) Vérifiez, avec un exemple, que le produit de deux matrices de Pauli différentes retourne la troisième matrice de Pauli.

c) Comment ce résultat change si vous changez l'ordre du produit ?

Porte $\hat{S}$

La porte $\hat{S}$ effectue une rotation d'un quart de tour dans le sens antihoraire ($\pi/2$ rad) autour de l'axe des z, comme cela est illustré à la figure 1.7b. Une succession de deux de ces portes effectue donc une rotation d'un demi-tour résultant en une porte $\hat{Z}$. Autrement dit

$$\hat{S}\hat{S} = \hat{S}^2 = \hat{Z}. \tag{1.18}$$

Pour cette raison, cette porte quantique porte également le nom de racine carrée de $\hat{Z}$ (*square root of* $\hat{Z}$ en anglais). La matrice représentant cette transformation est

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}.$$

L'équation 1.18 montre également que la porte $\hat{S}$ n'est pas sa propre inverse. Par définition, l'inverse de $\hat{S}$ est $\hat{S}^\dagger$ et correspond à une rotation d'un quart de tour dans le sens horaire ($-\pi/2$ rad) autour de l'axe des z (voir figure 1.7c).

Exercice B.5 : Une version alternative pour $\hat{S}$

Montrez que la matrice

$$\hat{S}' = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1-i & 0 \\ 0 & 1+i \end{pmatrix}.$$

est égale à la matrice $\hat{S}$ à un facteur de phase global près. Expliquez ensuite les conséquences d'utiliser la matrice $\hat{S}'$ plutôt que la matrice $\hat{S}$ pour représenter la porte $\hat{S}$.

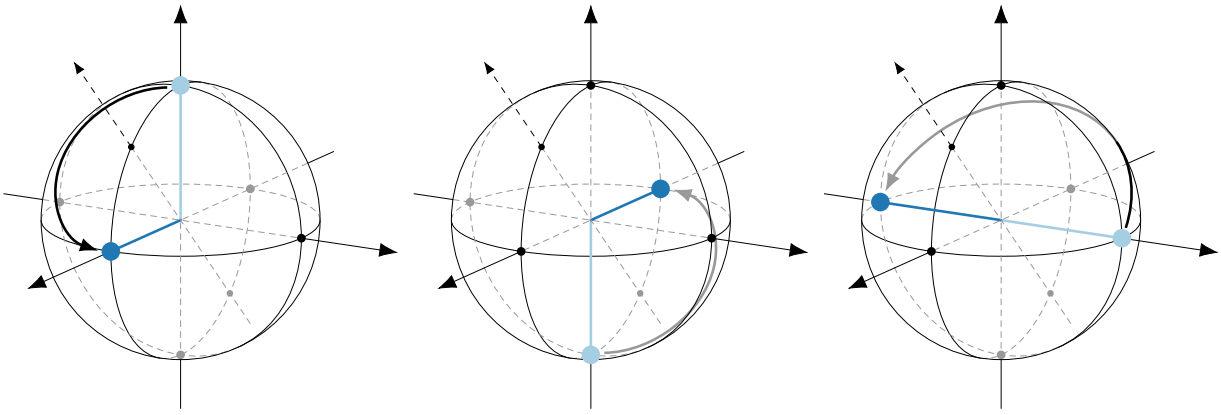
Porte Hadamard ($\hat{H}$)

La porte Hadamard permet de préparer un état quantique en superposition d'états à partir d'un état de base. La porte Hadamard est équivalente à une rotation de π rad autour d'un axe qui se situe à $\pi/4$ entre les axes x et z comme cela est illustré à la figure 1.8. Ses effets sur les deux états de base sont

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

La matrice qui permet d'appliquer une porte Hadamard est donc

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



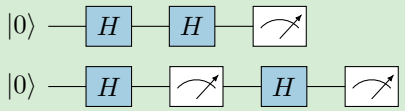
(a) (b) (c)

FIGURE 1.8 – Exemples des trajectoires pour les transformations de différents états initiaux avec la porte Hadamard. Ces trajectoires sont générées par une rotation de π rad (180°) autour d'un axe situé à $\pi/4$ rad (45°) entre les axes x et z. La porte Hadamard transforme (a) l'état $|0\rangle$ en $|+\rangle$, (b) l'état $|1\rangle$ en $|-\rangle$ et (c) l'état $|+i\rangle$ en $|-i\rangle$

La porte Hadamard est sa propre inverse.

Exercice B.6 : Porte Hadamard et mesure intermédiaire

Considérez les deux circuits ci-contre. Pour chacun d'eux, quelles sont les probabilités d'obtenir les résultats 0 et 1 lors de la mesure finale ?



Porte identité ($\hat{I}$)

Terminons cette section avec la porte la plus triviale qui soit : la porte-identité qui laisse un état quantique inchangé. La matrice qui la représente est simplement la matrice identité

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

En général, cette porte n'apparait pas explicitement dans les circuits quantiques.

B.10 Portes quantiques paramétrées

Les portes quantiques vues à la section précédente ont toutes des effets fixes ; c'est-à-dire des rotations autour d'axes donnés pour des angles de π ou $\pi/2$ (sauf l'identité qui laisse l'état inchangé). On peut cependant construire des portes dont l'effet dépend d'un ou plusieurs paramètres : ce sont des portes quantiques paramétrées. En particulier, les rotations autour des axes x, y et z pour des angles arbitraires sont des portes paramétrées.

Rotation autour de y

Voyons d'abord la rotation d'un angle θ autour de l'axe y, notée $\hat{R}_y(\theta)$. La matrice qui représente cette rotation est la suivante

$$\hat{R}_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}.$$

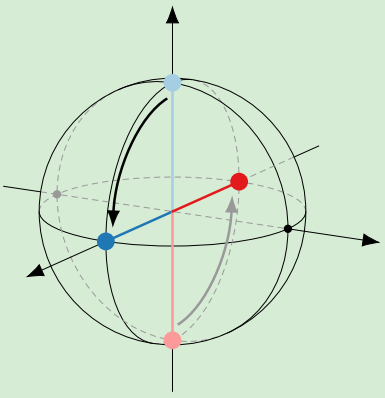
En particulier, une rotation $\hat{R}_y$ d'un angle π n'est rien d'autre qu'une porte $\hat{Y}$.

On remarque que les éléments de matrice de $\hat{R}_y$ sont réels. Par conséquent, la transformation d'un état quantique aux coefficients réels avec cette porte produit un nouvel état quantique aux coefficients réels. En effet, un état dans le plan xz sur la sphère de Bloch restera dans ce plan après une rotation autour de l'axe y.

Exercice B.7 : La porte Hadamard vs R_y

La figure ci-contre illustre une rotation de $\pi/4$ autour de l'axe des y (aussi notée $\hat{R}_y(\pi/4)$) appliquée aux deux états de base. En comparant cet effet à l'effet de la porte Hadamard aux figures 1.8a et b, on pourrait croire que ces deux rotations ont le même effet. Trouver un argument qui montre hors de tout doute que ces deux rotations sont différentes

$$\hat{H} \neq \hat{R}_y(\pi/4).$$



Rotation autour de z

La matrice qui permet d'effectuer une rotation d'un angle θ autour de l'axe des z est

$$\hat{R}_z(\theta) = \begin{pmatrix} \exp(-i\theta/2) & 0 \\ 0 & \exp(i\theta/2) \end{pmatrix}$$

La porte $\hat{R}_z$ modifie la phase relative d'un état quantique à un qubit en appliquant une phase de $-\theta/2$ à la composante de l'état $|0\rangle$ et une phase $\theta/2$ à celle de l'état $|1\rangle$. La porte de phase

$$\hat{P}(\theta) = \exp(i\theta/2)\hat{R}_z(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\theta) \end{pmatrix}$$

a le même effet en appliquant uniquement une phase θ à l'état $|1\rangle$.

Rotation autour de x

La porte quantique $\hat{R}_x$ permet d'effectuer une rotation autour de l'axe des x

$$\hat{R}_x(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -i\sin(\theta/2) \\ -i\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}.$$

Exercice B.8 : Le retour des portes $\hat{X}$, $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$

Montrez que les rotations $\hat{R}_x(\theta)$, $\hat{R}_y(\theta)$ et $\hat{R}_z(\theta)$ pour le même angle $\theta = \pi$ ont respectivement les mêmes effets que les portes $\hat{X}$, $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$.

Exercice B.9 : Identités pour des portes à un qubit

Démontrez les identités suivantes :

a) $\hat{Z} = \hat{H}\hat{X}\hat{H}$

b) $\hat{Y} = \hat{S}\hat{X}\hat{S}^\dagger$

c) $\hat{Z}\hat{H} = \hat{H}\hat{X}$

d) $\hat{Z}\hat{X} = -\hat{X}\hat{Z}$

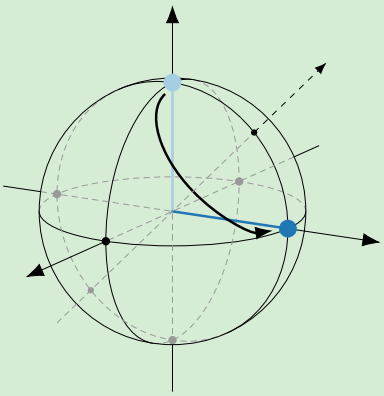
Exercice B.10 : Inventons une nouvelle porte quantique

On aimerait construire une nouvelle porte quantique $\hat{G}$ ayant un effet similaire à la porte Hadamard, mais qui effectue une rotation d'un angle π autour d'un axe située à $\pi/4$ entre les axes y et z, comme c'est illustré à la figure ci-contre.

a) Combinez un certain nombre des portes quantiques déjà vues, dont la porte Hadamard, pour obtenir une porte quantique $\hat{G}$ qui applique la rotation désirée.

b) Obtenez la matrice qui représente cette transformation dans la base computationnelle et vérifiez que l'application de $\hat{G}$ transforme les états quantiques suivants de la manière attendue

$$\hat{G}\,|0\rangle = |+i\rangle\,, \qquad \hat{G}\,|1\rangle = |-i\rangle\,, \qquad \hat{G}\,|+\rangle = |-\rangle\,.$$



B.11 Formulation dyadique d'une porte quantique

Il existe une notation très intuitive pour les portes quantiques qui fait usage de la notation *ket-bra*, c'est-à-dire,

$$|u\rangle\langle v|\,.$$

Ce *ket-bra*, lorsqu'appliqué à l'état $|v\rangle$, produit l'état

$$|u\rangle\langle v|\,|v\rangle = |u\rangle$$

et agit donc comme une matrice. En effet, pour des états définis comme

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} v_0 \\ v_1 \end{pmatrix}$$

on utilise le produit dyadique pour construire la matrice

$$|u\rangle\langle v| = \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_0^* & v_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0 v_0^* & u_0 v_1^* \\ u_1 v_0^* & u_1 v_1^* \end{pmatrix}.$$

En général, une porte quantique pourra s'écrire comme une combinaison linéaire de produits dyadiques.

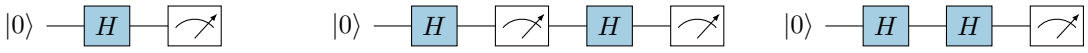
Exemple B.4 : Formulation dyadique d'une porte quantique

Calculons les produits dyadiques entre les états de base pour un qubit

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad |0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
$$|1\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Cela nous permet d'écrire, par exemple, les formulations dyadiques pour les portes $\hat{I}$, $\hat{Z}$ et $\hat{X}$

$$\hat{I} = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
$$\hat{Z} = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
$$\hat{X} = |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$



(a) (b) (c)

FIGURE 1.9 – Circuits quantiques utilisant la porte Hadamard pour illustrer l'effet d'interférence quantique.

Exercice B.11 : Formulation dyadique de la porte Hadamard

La formulation dyadique de la porte Hadamard à l'aide des états de base est

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

Trouvez une formulation dyadique plus compacte pour cette porte.

B.12 Discussion sur la superposition et l'interférence

Lors de notre premier contact avec la mesure aux sections A.6 et A.7, nous avons affirmé qu'un qubit placé dans un état quantique

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle$$

qui est ensuite mesuré, a une probabilité $|\alpha|^2$ de retourner la valeur 0 et une probabilité $|\beta|^2$ de retourner la valeur 1. Face à l'étrangeté de la mécanique quantique, on pourrait être tenté de questionner cette interprétation. Est-il possible que le qubit était déjà dans l'état $|0\rangle$ ou déjà dans l'état $|1\rangle$ avec des probabilités $|\alpha|^2$ et $|\beta|^2$, mais que nous ignorions simplement cette information ? En d'autres mots, est-ce qu'un qubit peut être en superposition d'états et la mesure projète celui-ci dans un état donné, ou est-ce que tout cela n'est qu'une manifestation de notre ignorance sur l'état du système ?

Pour lever ce doute, considérons l'utilisation de la porte Hadamard pour préparer un état de superposition

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

et considérons les deux scénarios possibles : 1. un classique où la superposition n'existe pas et l'application d'une porte Hadamard ne fait que *mélanger* le qubit 2. un quantique où la porte Hadamard permet vraiment de préparer une superposition d'états.

Scénario classique

Avec nos nouveaux outils de programmation quantique, ce scénario peut être reproduit par une porte Hadamard suivie d'une mesure, comme illustré à la figure 1.9a. Ainsi, à chaque fois qu'on applique une porte Hadamard, on *mélange* le qubit un peu comme si on lançait une pièce de monnaie, mais qu'on ne regardait pas le résultat.

Si on effectue deux fois cette opération, on agit comme le circuit à la figure 1.9b. Le résultat final sera alors 0 une fois sur deux et 1 l'autre fois [2].

Scénario quantique

En revanche, si on admet que la porte Hadamard appliquée à l'état $|0\rangle$ permet de préparer une superposition d'états, l'application d'une seconde porte Hadamard (comme illustré à la figure 1.9c) devrait

2. Voir l'exercice B.6 pour plus de détails.

ramener le système dans son état initial, c'est-à-dire $|0\rangle$. Le résultat final sera alors 0 dans tous les cas. Bien que l'état du qubit soit en superposition d'états après la première porte Hadamard, l'interférence quantique fait que l'application de la seconde réduit à zéro les probabilités d'obtenir le résultat 1.

En pratique, c'est le deuxième scénario qui est observé d'où l'importance et la pertinence de la théorie de la mécanique quantique.

S Solutions aux exercices

Exercice A.1 : Vecteurs d'état

Les vecteurs pour ces états sont

a) $|\phi\rangle = \begin{pmatrix}\gamma\\ \delta\end{pmatrix}$

b) $|\psi\rangle = \begin{pmatrix}b\\ a\end{pmatrix}$

c) $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}$

d) $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}$

e) $|\eta\rangle = e^{i\varphi_0}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}ae^{i\varphi_0}\\ be^{i\varphi_0}\end{pmatrix}$

f) $|\theta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$

Exercice A.2 : Ordre du produit scalaire

En utilisant les états quantiques

$$|\psi_a\rangle = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle \qquad \text{et} \qquad |\psi_b\rangle = b_0|0\rangle + b_1|1\rangle,$$

ces produits scalaire sont

$$\langle\psi_a|\psi_b\rangle = a_0^* b_0 + a_1^* b_1 \qquad \text{et} \qquad \begin{aligned}\langle\psi_b|\psi_a\rangle &= b_0^* a_0 + b_1^* a_1\\ &= a_0 b_0^* + a_1 b_1^*.\end{aligned}$$

On remarque que les deux produits scalaires sont égaux à un complexe conjugué près

$$\langle\psi_a|\psi_b\rangle = \langle\psi_b|\psi_a\rangle^*.$$

Exercice A.3 : Normalisation

Les états $|\psi_a\rangle$, $|\psi_b\rangle$, $|\psi_d\rangle$ et $|\psi_f\rangle$ sont normalisés. Voici les preuves,

(a) $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = 1$

(b) $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = 1$

(c) $\left(\frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{2}{3}\right)^2 = \frac{5}{9} \neq 1$

(d) $\left(\sqrt{\frac{3}{4}}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 = 1$

(e) $(0.9)^2 \neq 1$

(f) $(-1)^2 = 1.$

Exercice A.4 : Renormalisation

Pour le démontrer, on doit simplement effectuer le produit scalaire de $|\psi'\rangle$ avec lui-même

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \left(\frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle^{1/2}}\langle\psi|\right)\left(\frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle^{1/2}}|\psi\rangle\right) = \frac{\langle\psi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = 1.$$

Exercice A.6 : Probabilités de mesure

a) Les deux réponses suivantes sont bonnes

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle \qquad |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|0\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle$$

b) L'état suivant respecte ces probabilités

$$|\psi\rangle = \sqrt{p}|0\rangle + \sqrt{1-p}|1\rangle$$

Exercice B.3 : La porte $\hat{X}$

(a) On applique la porte $\hat{X}$ sur l'état général

$$\hat{X}\,|\psi\rangle = \alpha\hat{X}\,|0\rangle + \beta\hat{X}\,|1\rangle = \alpha\,|1\rangle + \beta\,|0\rangle = \beta\,|0\rangle + \alpha\,|1\rangle$$

(b) Pour que l'état précédent soit égal à l'état initial, on doit avoir $\alpha = \beta$. La condition de normalisation nous permet d'identifier un état (aux composantes réelles)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|1\rangle$$

ou tout autre état à une phase globale près.

(c) La condition est $\alpha = -\beta$, ce qui nous permet d'identifier un autre état

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\,|1\rangle$$

ou tout autre état à une phase globale près.

Chapitre 2

Deux qubits

Un système d'un seul qubit est intéressant pour étudier des propriétés fondamentales de la mécanique quantique, mais son utilité est limitée. Il est nécessaire d'utiliser plusieurs qubits si on veut arriver à faire un calcul quantique. Dans ce chapitre, nous allons considérer un système de deux qubits. Nous allons d'abord voir comment décrire l'état d'un tel système et ensuite comment il est possible de le modifier en utilisant des portes quantiques à deux qubits.

Une fois que nous aurons bien compris et décrit un système de deux qubits, nous aurons tous les outils en main afin d'en ajouter davantage. Nous serons également mieux équipés pour appréhender l'immense potentiel du calcul quantique.

A État à deux qubits

Pour décrire un état à deux qubits, considérons deux qubits (un qubit rouge et un qubit bleu) dans des états quelconques. Si on mesure le premier qubit, il retournera la valeur 0 ou la valeur 1 (2 possibilités). C'est la même chose pour l'autre qubit (0 ou 1). Dans son ensemble, le groupe de deux qubits retournera l'un des quatre (2×2 possibilités) résultats suivants [1]

$$00, \quad 01, \quad 10 \quad \text{ou} \quad 11$$

chacun avec une probabilité donnée. Un état quantique à deux qubits s'exprime donc sur quatre états de base que l'on note

$$|00\rangle, \quad |01\rangle, \quad |10\rangle \quad \text{et} \quad |11\rangle.$$

On peut déjà anticiper que l'état quantique d'un système de deux qubits prend la forme d'une combinaison linéaire de ces quatre états de base

$$|\psi\rangle = \alpha\,|00\rangle + \beta\,|01\rangle + \gamma\,|10\rangle + \delta\,|11\rangle \tag{2.1}$$

où α, β, γ et δ sont des amplitudes de probabilités [2].

Lors de la mesure d'un tel état, les probabilités d'obtenir chacun des quatre résultats possibles sont également données par le module au carré de ces amplitudes de probabilités. Ces amplitudes de probabilité sont donc également soumises à une condition de normalisation

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1 \tag{2.2}$$

afin que la somme des probabilités soit 100%.

Le système de deux qubits est donc, en apparence, très similaire à celui d'un seul qubit à la seule différence qu'il y a quatre résultats possibles à la mesure au lieu de seulement deux.

1. Notez que l'on place le premier qubit (rouge) le plus à droite pour suivre la convention de petit-boutisme (*little-endian*).
2. Nous arriverons à la même forme de manière plus rigoureuse un peu plus loin.

A.1 Vecteur d'état

L'état quantique à deux qubits à l'équation 2.1 fait intervenir quatre états de base. Le vecteur d'état pour un système de deux qubits est donc un vecteur à quatre composantes

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

qui respectent la condition de normalisation à l'équation 2.2. Ce vecteur est écrit dans la base des états à deux qubits

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{2.4}$$

Exercice A.1 : Construction d'un état à deux qubits

Remplacez les vecteurs d'état pour les états de base dans l'équation 2.1 pour vérifier que le vecteur d'état est bien celui donné à l'équation 2.3.

Remarque

Lorsqu'on écrit un état quantique grâce à son vecteur d'état, il est important de garder en tête dans quelle base celui-ci est exprimé. Par exemple, les deux vecteurs d'état suivants

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \begin{pmatrix} \alpha \\ \gamma \\ \beta \\ \delta \end{pmatrix}$$

pourraient représenter le même état, en fonction de quelle base est utilisée soit

$$\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\} \quad \text{ou} \quad \{|00\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |11\rangle\}$$

Pour éviter toute confusion, on peut soit utiliser une notation explicite, mais généralement plus lourde, ou bien adhérer à une convention et la suivre à la lettre. Dans notre cas, nous utiliserons la convention où les états de base sont ordonnés en fonction des entiers qu'ils représentent (revoir la section A.3 pour plus de précisions).

A.2 Produit tensoriel

Les vecteurs pour la base des états à deux qubits (équation 2.4) ont simplement été posés comme tels. On peut cependant les construire à partir des états de base à un qubit grâce à une opération : le produit tensoriel.

On note le produit tensoriel grâce au symbole $\otimes$. Par exemple, la définition de l'état de base à deux qubits où les deux qubits sont dans l'état $|0\rangle$ s'écrit

$$|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle .$$

En termes de vecteurs d'état le produit tensoriel de deux états s'effectue en multipliant le deuxième vecteur par chacune des composantes du premier et en assemblant un vecteur de plus grande dimension. Par exemple, le produit tensoriel précédent s'effectue de la manière suivante

$$|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \times 1 \\ 1 \times 0 \\ 0 \times 1 \\ 0 \times 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{2.5}$$

Le produit tensoriel permet donc de combiner les espaces de deux systèmes en un espace plus grand.

Exercice A.2 : Produit tensoriel et états de base à deux qubits

Combinez les deux états de base à un qubit en utilisant le produit tensoriel pour construire les quatre vecteurs d'état de base à deux qubits de l'équation 2.4.

Info notation A.1 : Produit tensoriel

Les trois expressions suivantes sont parfois utilisées pour le produit tensoriel de deux états quantiques (pour des qubits a et b) et sont jugées équivalentes

$$|0\rangle_b \otimes |1\rangle_a = |0\rangle_b |1\rangle_a = |01\rangle .$$

Aussi, il est parfois nécessaire d'annoter les états de base avec un indice afin de pouvoir identifier à quel qubit ils sont associés (par exemple : $|0\rangle_b$ ou $|1\rangle_a$). Dans bien des cas, il est cependant suffisant de conserver toujours le même ordre dans l'écriture pour arriver au même résultat. Ainsi, les notations suivantes sont également équivalentes

$$|0\rangle \otimes |1\rangle = |0\rangle |1\rangle = |01\rangle .$$

A.3 États produits (à deux qubits)

Le produit tensoriel s'applique à tous les états quantiques en général. Par exemple, considérons les états quantiques de deux qubits a et b respectivement

$$|a\rangle = a_0 |0\rangle_a + a_1 |1\rangle_a \quad \text{et} \quad |b\rangle = b_0 |0\rangle_b + b_1 |1\rangle_b \tag{2.6}$$

où les indices aux kets $|\cdot\rangle_a$ et $|\cdot\rangle_b$ permettent d'identifier les états de base pour chacun des qubits. Le produit tensoriel de ces deux états à un qubit génère l'état à deux qubits

$$|\psi\rangle = |b\rangle \otimes |a\rangle .$$

Si on remplace les expressions des états de l'équation 2.6 et que l'on distribue le produit tensoriel, on obtient

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= (b_0 |0\rangle_b + b_1 |1\rangle_b) \otimes (a_0 |0\rangle_a + a_1 |1\rangle_a) \\ &= b_0 a_0 |0\rangle_b \otimes |0\rangle_a + b_0 a_1 |0\rangle_b \otimes |1\rangle_a + b_1 a_0 |1\rangle_b \otimes |0\rangle_a + b_1 a_1 |1\rangle_b \otimes |1\rangle_a \\ &= b_0 a_0 |00\rangle + b_0 a_1 |01\rangle + b_1 a_0 |10\rangle + b_1 a_1 |11\rangle \end{aligned} \tag{2.7}$$

ou encore en notation vectorielle

$$|\psi\rangle = |b\rangle \otimes |a\rangle = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \\ b_1 \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 a_0 \\ b_0 a_1 \\ b_1 a_0 \\ b_1 a_1 \end{pmatrix} . \tag{2.8}$$

Un tel état construit comme le produit tensoriel des états de deux sous-systèmes est appelé un état produit.

Lorsque les états quantiques de deux systèmes quantiques (par exemple deux qubits) sont indépendants (par exemple s'ils sont isolés l'un de l'autre) l'état quantique qui décrit l'ensemble du système s'appelle un état produit. On dit aussi que l'état du système est factorisable. Les états produits ne constituent qu'un sous-ensemble de tous les états quantiques possibles. Un état quantique qui ne peut pas être écrit comme le produit de deux états est appelé un état intriqué.

Exercice A.3 : Probabilités pour un état produit

Montrez que la probabilité de mesurer le qubit a dans l'état $|0\rangle$ et le qubit b dans l'état $|1\rangle$ (à l'équation 2.6) est la même que de mesurer le système de deux qubits (à l'équation 2.7) dans l'état $|10\rangle$. Refaites le même exercice pour les trois autres résultats possibles.

Exercice A.4 : Normalisation d'un état produit

Montrez que si les états à un qubits à l'équation 2.6 sont normalisés, l'état produit à deux qubits à l'équation 2.7 l'est aussi.

A.4 Intrication

L'expression à l'équation 2.3 est plus générale que celle à l'équation 2.8. En effet, l'équation 2.3 permet de décrire des états quantiques à deux qubits que l'équation 2.8 ne peut pas décrire. Par exemple l'état

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle \tag{2.9}$$

ne peut pas être construit à partir de deux états à un qubit. En d'autres mots, les états produits sont un sous-ensemble de tous les états quantiques possibles.

Exercice A.5 : Factorisation impossible

Essayez de factoriser l'état de l'équation 2.9. C'est-à-dire essayez de le décomposer sous la forme $|\phi^+\rangle = |b\rangle\,|a\rangle$ avec

$$|a\rangle = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle \text{ et } |b\rangle = b_0|0\rangle + b_1|1\rangle$$

et montrez mathématiquement que cela est impossible.

Les états qui ne peuvent pas être factorisés (comme celui à l'équation 2.9) sont dits *intriqués*. L'intrication quantique apparait lorsqu'au moins deux objets quantiques (comme des qubits) formant un système quantique ne peuvent pas être décrits indépendamment. On peut voir l'intrication comme le fait que c'est le système quantique dans son ensemble qui est en superposition d'états et pas seulement les éléments qui le composent !

Après la superposition (section A.1), l'intrication est le deuxième phénomène quantique à la base du calcul quantique que nous rencontrons.

On parle aussi de corrélations quantiques, car lorsque les qubits participants à un état intriqué seront mesurés, les résultats sur chacun d'eux seront corrélés. Cela veut dire que le résultat de mesure sur le premier qubit détermine le résultat de mesure du second et vice versa. Autrement dit, si on acquiert de l'information sur l'état d'un des qubits qui participent à un état intrinqué, on acquiert également de l'information sur le reste du système. Voir l'exemple A.2 pour plus de détails.

A.5 Mesure d'états à deux qubits

Pour un état quantique à deux qubits quelconque écrit sous la forme

$$|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle$$

la probabilité d'obtenir 0 et 0 après la mesure des deux qubits est donnée par $|\alpha|^2$, la probabilité d'obtenir 0 et 1 (dans cet ordre) est $|\beta|^2$, et ainsi de suite. On peut donc résumer ces probabilités par

$$p_{00} = |\alpha|^2 \qquad p_{01} = |\beta|^2 \qquad p_{10} = |\gamma|^2 \qquad p_{11} = |\delta|^2.$$

La mesure partielle

Il est cependant possible de mesurer un seul des deux qubits. On parle alors d'une mesure partielle du système quantique. Cela permet de répondre à la question : quelle est la probabilité d'obtenir le résultat 0 si on mesure seulement le qubit de droite ? Notons cette probabilité $p_{\bullet 0}$ pour insister sur le fait qu'on ne mesure pas le qubit de gauche. Dans ce cas, on doit considérer tous les états de base où le qubit de droite

dans l'état $|0\rangle$. La probabilité est la somme des probabilités associée à chacun de ces états. La probabilité de mesurer le qubit de droite dans l'état 0 est donc

$$p_{\bullet 0} = |\alpha|^2 + |\gamma|^2$$

et celle de le mesurer dans l'état 1 est

$$p_{\bullet 1} = |\beta|^2 + |\delta|^2.$$

La mesure d'un système quantique projette le système dans l'état quantique associé au résultat obtenu. La mesure partielle projette uniquement le sous-système qui a été mesuré, ici le qubit de droite. Par exemple, si le résultat obtenu précédemment est 0, le système est projeté dans un état quantique proportionnel à

$$|\psi^{(0)}\rangle \propto \alpha\,|00\rangle + \gamma\,|10\rangle$$

où on ne conserve que les états quantiques qui correspondent au résultat obtenu. Le symbole de proportionnalité est nécessaire, car les composantes α et γ ne définissent pas un état normalisé. On peut cependant effectuer une normalisation pour écrire

$$|\psi^{(0)}\rangle = \frac{\alpha\,|00\rangle + \gamma\,|10\rangle}{(|\alpha|^2 + |\gamma|^2)^{1/2}}$$

Similairement, si le résultat de la mesure est 1, l'état du système est alors projeté dans

$$|\psi^{(1)}\rangle = \frac{\beta\,|01\rangle + \delta\,|11\rangle}{(|\beta|^2 + |\delta|^2)^{1/2}}$$

Exemple A.1 : La mesure partiel d'un état produit

Pour un état produit, les deux qubits peuvent être considérés comme étant des systèmes indépendants. Vérifions que la mesure partielle est cohérente avec cela. Considérons donc l'état produit $|b\rangle \otimes |a\rangle$ écrit à l'équation 2.8

$$|\psi\rangle = b_0 a_0\,|00\rangle + b_0 a_1\,|01\rangle + b_1 a_0\,|10\rangle + b_1 a_1\,|11\rangle\,.$$

La probabilité d'obtenir 0 lors d'une mesure partielle du qubit de droite est donnée par

$$p_{\bullet 0} = |b_0 a_0|^2 + |b_1 a_0|^2 = \Big(|b_0|^2 + |b_1|^2\Big)|a_0|^2$$

où on a pu mettre $|a_0|^2$ en évidence. Comme l'état du qubit $|b\rangle$ est normalisé, on retrouve donc

$$p_{\bullet 0} = |a_0|^2$$

qui n'est rien d'autre que la probabilité d'obtenir 0 lors de la mesure du qubit $|a\rangle$ si on l'avait considéré indépendamment. L'état quantique résultant de cette mesure est alors

$$|\psi^{(0)}\rangle = \frac{b_0 a_0\,|00\rangle + b_1 a_0\,|10\rangle}{\Big(|b_0 a_0|^2 + |b_1 a_0|^2\Big)^{1/2}}.$$

En procédant à diverses simplifications, on peut réécrire cet état simplement comme,

$$|\psi^{(0)}\rangle = (b_0\,|0\rangle + b_1\,|1\rangle) \otimes |0\rangle\,.$$

qui n'est rien d'autre que l'état produit où l'état du qubit $|b\rangle$ est inchangé et où l'état du qubit $|a\rangle$ a été projeté dans l'état 0.

Exemple A.2 : La mesure d'un état intriqué

Supposons qu'on prépare un système de deux qubits dans l'état $|\Phi^+\rangle$ de l'équation 2.9 et qu'on procède à la mesure du qubit de droite. Les probabilités d'obtenir 0 et 1 sont données par

$$p_{\bullet 0} = \frac{1}{2} \quad \text{et} \quad p_{\bullet 1} = \frac{1}{2}.$$

Les états quantiques résultants (renormalisés) dans ces deux cas sont

$$|\psi^{(0)}\rangle = |00\rangle \quad \text{et} \quad |\psi^{(1)}\rangle = |11\rangle$$

Ainsi, après la mesure, le système sera soit dans l'état $|00\rangle$ si on a mesuré 0, soit dans l'état $|11\rangle$ si on a mesuré 1. Le résultat de la mesure du second qubit est alors déjà déterminé. Si on le mesure, on constatera que les résultats des deux mesures sont toujours identiques.

Insistons sur le fait que le résultat de la première mesure est aléatoire, mais détermine ici complètement le résultat de la seconde.

A.6 États quantiques notables (à deux qubits)

Décrivons quelques états quantiques à deux qubits qui reviennent régulièrement en calcul quantique.

Superposition uniforme

L'état en superposition uniforme pour deux qubits est un état où toutes les amplitudes de probabilités sont égales. Cet état est donc,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)$$

où chaque état de base à une chance sur 4 (25%) d'être observé.

Exercice A.6 : États de superposition uniforme à deux qubits

Montrez que l'état de superposition uniforme à deux qubits est un état produit

$$|q_1\rangle \otimes |q_0\rangle$$

et déterminez les états à un qubit $|q_0\rangle$ et $|q_1\rangle$ qui le constituent.

Les paires de Bell

L'état 2.9 qu'on a utilisé pour illustrer l'intrication est aussi appelé *la première paire de Bell*. On peut identifier quatre paires de Bell, aussi appelées états de Bell,

$$\begin{aligned} |\Phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle & |\Phi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle \\ |\Psi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|01\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle & |\Psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|01\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle . \end{aligned} \tag{2.10}$$

Tous ces états sont des états intriqués. En fait, il s'agit des états à deux qubits maximalement intriqués. Chaque état de Bell est orthogonal aux autres états de Bell.

Exercice A.7 : Paires de Bell orthogonales

Montrez que l'état de Bell $|\Phi^+\rangle$ est orthogonal aux trois autres états de Bell.

Remarque

Notez que comme les quatre états de base $\{|00\rangle, |01\rangle, |01\rangle, |11\rangle\}$, les quatre états de Bell peuvent également être utilisés comme une base canonique pour les états à deux qubits. En d'autres mots, n'importe quel état à deux qubits peut être exprimé comme une combinaison linéaire

$$|\psi\rangle = \alpha' |\Phi^+\rangle + \beta' |\Phi^-\rangle + \gamma' |\Psi^+\rangle + \delta' |\Psi^-\rangle$$

où les composantes α', β', γ' et δ' respectent une condition de normalisation. Cela est possible, car les états de Bell sont normalisés et mutuellement orthogonaux.

B Portes quantiques à deux qubits

Pour préparer des états quantiques à deux qubits qui ne sont pas de simples états produits, nous aurons besoin d'outils qui font interagir les qubits : des portes à deux qubits.

Une porte à 2 qubits permet de modifier un système de 2 qubits. Comme un tel système comporte 4 vecteurs de base (équation 2.4), une porte à deux qubits est représentée par une matrice 4×4

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} P_{00} & P_{01} & P_{02} & P_{03} \\ P_{10} & P_{11} & P_{12} & P_{13} \\ P_{20} & P_{21} & P_{22} & P_{23} \\ P_{30} & P_{31} & P_{32} & P_{33} \end{pmatrix}.$$

Ce qui distingue les portes quantiques à deux qubits de celles à un qubit est simplement le nombre de dimensions de l'espace dans lequel elles agissent. Ainsi, l'application d'une porte quantique à deux qubits s'effectue comme pour une porte quantique à un qubit

$$|\psi'\rangle = \hat{P} |\psi\rangle$$

où $|\psi\rangle$ est l'état initial du système de deux qubits et $|\psi'\rangle$, son état final. De plus, comme les portes à un qubit et toutes les autres portes quantiques, les portes à deux qubits doivent également être unitaires afin de préserver la normalisation des états quantiques qu'elles transforment.

B.1 Diagramme

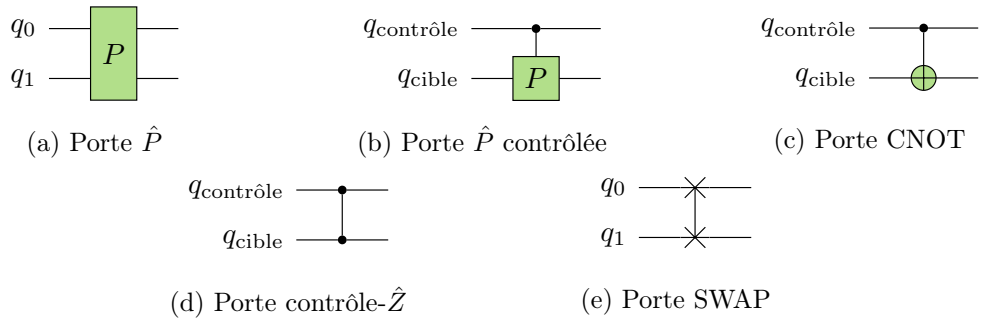
En représentation diagrammatique, la porte quantique à deux qubits apparait comme une boite qui agit sur deux qubits et qui recouvre les deux lignes horizontales associées à ces deux qubits, comme illustrés à la figure 2.1a. Chaque ligne horizontale représente l'évolution de chaque qubit et elles sont généralement numérotées à partir de 0 pour la ligne du haut de sorte que la porte à deux qubits agit sur les états de base $|q_1 q_0\rangle$.

Certaines portes quantiques à deux qubits utilisent des diagrammes différents (figures 2.1b à 2.1e). Cependant, dans tous les cas, ces diagrammes impliquent toujours deux qubits.

B.2 Portes contrôlées

De nombreuses portes à deux qubits sont en fait des versions dites *contrôlées* de portes à un qubit. Pour ce type de porte à deux qubits, un des qubits est le *qubit de contrôle* et l'autre est le *qubit cible*. Le principe d'une porte contrôlée s'exprime ainsi : une porte à un qubit est appliquée au qubit cible si le qubit de contrôle est dans l'état $|1\rangle$, et ne fait rien si le qubit de contrôle est dans l'état $|0\rangle$.

Malgré cette description, insistons sur le fait que le qubit de contrôle n'a pas besoin d'être mesuré afin de déterminer si la porte à un qubit est appliquée sur le qubit cible. La porte contrôlée ne mesure pas le qubit de contrôle, mais va plutôt appliquer *et* ne pas appliquer la porte à un qubit *en même temps*, et ce, en fonction de l'état de superposition du qubit de contrôle.



(a) Porte $\hat{P}$ (b) Porte $\hat{P}$ contrôlée (c) Porte CNOT

(d) Porte contrôle-$\hat{Z}$ (e) Porte SWAP

FIGURE 2.1 – Représentations diagrammatiques de portes quantiques à deux qubits. Ces représentations seront utilisées pour construire des circuits quantiques.

En règle générale, on peut générer un état à deux qubits intriqués en appliquant une porte contrôlée à partir d'un qubit de contrôle qui est dans un état de superposition.

Info notation B.1 : Les portes contrôlées

Il existe de nombreuses notations pour les portes contrôlées. Nous allons utiliser la notation suivante pour une porte $\hat{P}$ appliquée au qubit q_{cible} et contrôlée par le qubit $q_{\text{contrôle}}$

$$C\hat{P}_{q_{\text{cible}}q_{\text{contrôle}}}.$$

Par exemple, la porte CNOT appliquée au qubit 1 à partir du qubit 0 s'écrit $C\hat{X}_{10}$. Pour alléger l'écriture, on omet parfois les indices des qubits. Dans ce cas, on suppose un système de deux qubits dans l'ordre suivant

$$|q_{\text{cible}}, q_{\text{contrôle}}\rangle\,.$$

On illustre les portes quantiques contrôlées comme à la figure 2.1b. Selon ce diagramme, la porte contrôlée ressemble à une porte quantique à un qubit appliquée sur le qubit cible (une boite qui recouvre la ligne associée au qubit cible), à la différence que son application est contrôlée par le qubit de contrôle (la boite est reliée par une ligne connectée à la ligne associée au qubit de contrôle).

Exemple B.1 : La porte contrôle-$\hat{X}$

Un bon exemple de porte contrôlée est la porte contrôle-$\hat{X}$ aussi nommée CNOT. Comme son nom l'indique, cette porte applique un $\hat{X}$ sur le qubit cible si le qubit de contrôle est dans l'état $|1\rangle$. Explicitons comment cette porte transforme chacun des états de base à deux qubits

$$C\hat{X}\,|00\rangle = |00\rangle \qquad C\hat{X}\,|01\rangle = |11\rangle \qquad C\hat{X}\,|10\rangle = |10\rangle \qquad C\hat{X}\,|11\rangle = |01\rangle\,.$$

En termes vectoriels, la porte CNOT transforme les quatre vecteurs de base (dans la base habituelle de l'équation 2.4) de la manière suivante

$$C\hat{X}\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix} \qquad C\hat{X}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix} \qquad C\hat{X}\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix} \qquad C\hat{X}\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}.$$

La forme matricielle de cette porte est donc

$$C\hat{X} = \begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\end{pmatrix}.$$

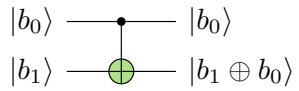


FIGURE 2.2 – La porte contrôle-$\hat{X}$ agit comme une fonction XOR.

B.3 Quelques portes quantiques à deux qubits

La porte contrôle-$\hat{X}$

Cette porte, illustrée à la figure 2.1c est une version contrôlée de la porte $\hat{X}$, c'est-à-dire qu'elle applique une porte $\hat{X}$ au qubit cible si le qubit de contrôle est dans l'état $|1\rangle$. On a déjà établi à l'exemple B.1 que la matrice qui représente cette porte à deux qubits est

$$C\hat{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

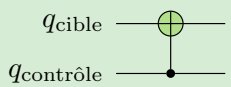
Comme la porte $\hat{X}$, la porte contrôle-$\hat{X}$ est sa propre inverse.

Fait intéressant, la porte contrôle-$\hat{X}$ agit comme une fonction XOR (voir la section A.4 au besoin) qui combine les états des qubits de contrôle et cible et les retourne sur le qubit cible, laissant le qubit de contrôle inchangé, comme illustré à la figure 2.2.

Exercice B.1 : Porte contrôle-$\hat{X}$ vers le haut

La porte contrôle-$\hat{X}$ est généralement définie de sorte que le qubit de contrôle est celui du haut et le qubit cible est celui du bas

$$|q_1, q_0\rangle = |q_{\text{cible}}, q_{\text{contrôle}}\rangle\,.$$



On peut spécifier l'ordre de ces qubits en écrivant $C\hat{X}_{\text{cible,contrôle}}$. Déduisez la matrice pour la porte $C\hat{X}_{01}$ où le qubit de contrôle est le qubit du bas

$$|q_1, q_0\rangle = |q_{\text{contrôle}}, q_{\text{cible}}\rangle\,.$$

La porte contrôle-$\hat{Z}$

Cette porte applique une porte $\hat{Z}$ au qubit cible si le qubit de contrôle est dans l'état $|1\rangle$. Or, comme la porte $\hat{Z}$ n'a pas d'effet si le qubit cible est dans l'état $|0\rangle$, cette porte agit uniquement si les deux qubits sont dans l'état $|1\rangle$, c'est-à-dire si le système est dans l'état $|11\rangle$. Dans ce cas, la phase de l'état est inversée, alors que rien ne se produit pour tous les autres états de base. Comme l'effet de la porte $\hat{Z}$ est d'inverser la phase, la forme matricielle de cette porte se déduit facilement comme étant

$$C\hat{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Cette porte apparait donc comme symétrique par rapport au qubit de contrôle et au qubit cible, d'où sa représentation diagrammatique illustrée à la figure 2.1d.

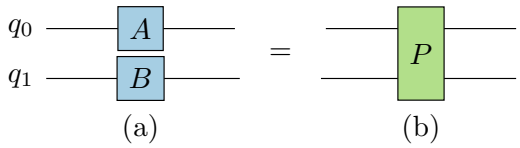


FIGURE 2.3 – L'application de portes quantiques à un qubit sur deux qubits peut être vue comme une seule porte à deux qubits.

Exercice B.2 : Porte controlée par $|0\rangle$

Il est parfois utile d'appliquer une porte contrôlée par l'état $|0\rangle$, c'est-à-dire que la porte est appliquée sur le qubit cible seulement si le qubit de contrôle est dans l'état $|0\rangle$ (la porte n'est pas appliquée s'il est dans l'état $|1\rangle$). Il est possible de construire une porte contrôlée par l'état $|1\rangle$ en *habillant* une porte contrôlée, c'est-à-dire en appliquant des portes avant et après celle-ci. Dessinez le circuit qui permet de faire cela.

La porte SWAP

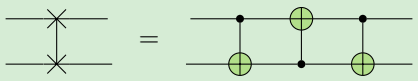
Il est parfois nécessaire de transporter l'état d'un qubit vers un autre. Comme les portes quantiques sont unitaires, il est uniquement possible d'échanger les états quantiques entre deux qubits. Cette opération s'effectue grâce à une porte SWAP. En termes des états de base, l'échange de deux qubits n'affecte pas les états $|00\rangle$ et $|11\rangle$, mais échange les coefficients associés aux états $|01\rangle$ et $|10\rangle$, d'où la représentation matricielle suivante

$$\text{SWAP} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

La figure 2.1e illustre une porte SWAP.

Exercice B.3 : Construction d'une porte SWAP

Montrez qu'on peut construire une porte SWAP en assemblant trois CNOT consécutifs de la manière suivante :



B.4 Portes à un qubit pour un système de deux qubits

Supposons que l'on applique des portes à un qubit $\hat{A}$ et $\hat{B}$ sur deux qubits (q_0 et q_1) qui font partie d'un système de deux qubits comme c'est illustré à la figure 2.3a. Comment cela affecte-t-il l'état à deux qubits du système ? Comment construit-on une porte à deux qubits (figure 2.3b) qui aurait le même effet ?

Pour répondre à ces deux questions, commençons par considérer deux qubits, respectivement dans des états $|a\rangle$ et $|b\rangle$. Notons l'état initial à deux qubits comme le produit tensoriel de ces deux états à un qubit

$$|\psi\rangle = |b\rangle \otimes |a\rangle\,. \tag{2.11}$$

Ensuite, appliquons la porte $\hat{A}$ sur q_0 et $\hat{B}$ sur q_1 de manières séparées. Cela transforme les deux états à un qubit en

$$|a'\rangle = \hat{A}\,|a\rangle \quad \text{et} \quad |b'\rangle = \hat{B}\,|b\rangle\,.$$

L'état final à deux qubits est le produit tensoriel de ces deux états

$$|\psi'\rangle = |b'\rangle \otimes |a'\rangle = \Big(\hat{B}\,|b\rangle\Big) \otimes \Big(\hat{A}\,|a\rangle\Big).$$

On cherche à exprimer cet état final en fonction de l'état initial à deux qubits. En d'autres termes on veut construire une porte $\hat{P}$ telle que

$$|\psi'\rangle = \hat{P}\,|\psi\rangle \tag{2.12}$$

Les propriétés du produit tensoriel nous permettent d'écrire

$$|\psi'\rangle = \Big(\hat{B}\,|b\rangle\Big) \otimes \Big(\hat{A}\,|a\rangle\Big) = \Big(\hat{B} \otimes \hat{A}\Big)(|b\rangle \otimes |a\rangle). \tag{2.13}$$

Alors que le produit tensoriel permet d'unir les états $|a\rangle$ et $|b\rangle$ en un état à deux qubits, il permet également d'unir les opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ en un opérateur à deux qubits. En combinant, les équations 2.11, 2.12 et 2.13, on déduit alors que

$$\hat{P} = \hat{B} \otimes \hat{A}. \tag{2.14}$$

L'opérateur $\hat{P}$ agit sur un espace à deux qubits en appliquant l'opérateur $\hat{A}$ dans l'espace du qubit q_0 et l'opérateur $\hat{B}$ dans l'espace du qubit q_1.

En termes matriciels, le produit tensoriel à l'équation 2.14 permet de construire la matrice 4×4 représentant l'opérateur $\hat{P}$ à partir des matrices 2×2 représentant les opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$. Ainsi, avec

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{00} & A_{01} \\ A_{10} & A_{11} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} B_{00} & B_{01} \\ B_{10} & B_{11} \end{pmatrix}$$

la matrice qui représente $\hat{P}$ peut être construite de la manière suivante

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} B_{00} & B_{01} \\ B_{10} & B_{11} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} A_{00} & A_{01} \\ A_{10} & A_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{00}\begin{pmatrix} A_{00} & A_{01} \\ A_{10} & A_{11} \end{pmatrix} & B_{01}\begin{pmatrix} A_{00} & A_{01} \\ A_{10} & A_{11} \end{pmatrix} \\ B_{10}\begin{pmatrix} A_{00} & A_{01} \\ A_{10} & A_{11} \end{pmatrix} & B_{11}\begin{pmatrix} A_{00} & A_{01} \\ A_{10} & A_{11} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \tag{2.15}$$

et on obtient la forme générale

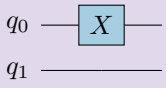
$$\hat{P} = \begin{pmatrix} B_{00}A_{00} & B_{00}A_{01} & B_{01}A_{00} & B_{01}A_{01} \\ B_{00}A_{10} & B_{00}A_{11} & B_{01}A_{10} & B_{01}A_{11} \\ B_{10}A_{00} & B_{10}A_{01} & B_{11}A_{00} & B_{11}A_{01} \\ B_{10}A_{10} & B_{10}A_{11} & B_{11}A_{10} & B_{11}A_{11} \end{pmatrix}.$$

Remarque

Notez comment la construction de la matrice représentant l'opérateur à deux qubits $\hat{P}$ à l'aide du produit tensoriel à l'équation 2.15 est cohérente avec la construction du vecteur d'état pour un système de deux qubits présentée à l'équation 2.5.

Exemple B.2 : Application d'une porte à un qubit sur un système à deux qubits

Illustrons le produit tensoriel d'opérateurs à un qubit en construisant la matrice 4×4 représentant le circuit à deux qubits suivant.



L'absence d'opération sur le qubit q_1 est équivalente à l'utilisation de la porte identité $\hat{I}$. Ainsi, la porte à deux qubits équivalente au circuit précédent est donc

$$\hat{I} \otimes \hat{X}$$

La matrice 4×4 qui applique ces opérations se construit donc de la manière suivante

$$\hat{P} = \hat{I} \otimes \hat{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & 0 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ 0 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & 1 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Appliquons l'opération $\hat{I} \otimes \hat{X}$ à l'état $|00\rangle$ pour vérifier la validité de cette matrice. D'abord, son effet sur l'état initial devrait être d'inverser l'état du qubit de droite

$$\hat{I} \otimes \hat{X} |00\rangle = \hat{I} |0\rangle \otimes \hat{X} |0\rangle = |01\rangle$$

ce qui correspond au deuxième vecteur de base. L'application de la matrice représentant cette opération sur le premier vecteur de base

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

retourne effectivement le deuxième vecteur de base. On peut ensuite répéter la même procédure pour chacun des trois autres états de base.

Info notation B.2 : Produit tensoriel de portes

Comme pour les états quantiques, les portes quantiques issues d'un produit tensoriel peuvent être écrites en utilisant différentes notations. Les notations suivantes sont équivalentes

$$\hat{Z}_b \otimes \hat{X}_a |0\rangle_b \otimes |1\rangle_a = \hat{Z}_b \hat{X}_a |0\rangle_b |1\rangle_a = \hat{Z} \otimes \hat{X} |01\rangle = \hat{Z}\hat{X} |01\rangle .$$

Dans les deux dernières expressions, l'ordre des portes quantique permet d'identifier avec un minimum de notation à quel qubit chaque porte est appliquée.

Cependant, cette notation est susceptible de créer de la confusion. En effet, prise hors contexte, on pourrait penser qu'il s'agit du produit entre les $\hat{Z}$ et $\hat{X}$, alors qu'en réalité ces deux opérations sont appliquées sur deux qubits différents. Elle est néanmoins régulièrement utilisée dans certains contextes qui ne laissent pas de place à l'ambigüité. En cas de doute, il est préférable d'identifier les qubits et les opérations qui s'y appliquent.

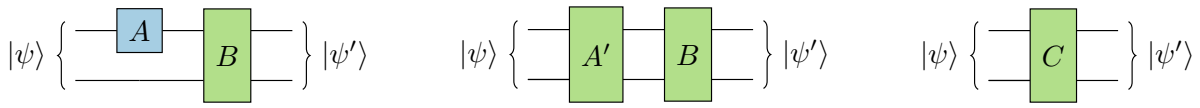
Dans la notation la plus compacte, le nombre de portes devrait donc toujours correspondre au nombre de qubits. Si un qubit reste inchangé, l'utilisation de la porte identité permet de le spécifier. Par exemple,

$$\hat{Z}_b |0\rangle_b |1\rangle_a = \hat{Z}\hat{I} |01\rangle .$$

Exercice B.4 : Produits tensoriels de portes quantiques

Construisez les matrices 4×4 qui représentent les opérations construites à partir de portes à un qubits suivantes :

(a) $\hat{X}\hat{X}$ (b) $\hat{Z}\hat{Z}$ (c) $\hat{Z}\hat{X}$ (d) $\hat{I}\hat{H}$



(a) (b) (c)

FIGURE 2.4 – La composition d'une porte quantique à un qubit avec une porte quantique à deux qubits (a) nécessite d'abord de réécrire la porte à un qubit comme un porte a deux qubits (b). Ensuite la composition des portes à deux qubits peut s'effectuer afin d'obtenir la porte quantique à deux qubits équivalente (c).

B.5 Composition de portes quantiques

Avec l'objectif de pouvoir décrire comment un circuit quantique transforme l'état quantique d'un système de qubit, il est essentiel de comprendre comment on peut composer des portes quantiques à un et deux qubits. Par exemple, le circuit quantique à la figure 2.4a transforme un état quantique initial à deux qubits $|\psi\rangle$ en un état quantique final $|\psi'\rangle$ en y appliquant successivement une porte à un qubit et une porte à deux qubits.

Afin de composer la porte $\hat{A}$ avec la porte $\hat{B}$ on doit d'abord obtenir une porte à deux qubits $\hat{A}'$ équivalente à l'application de la porte $\hat{A}$. En d'autres mots, on doit construire une porte $\hat{A}'$ qui agit sur un système de deux qubits de manière à appliquer $\hat{A}$ sur le premier et à laisser le second inchangé. Cela peut être fait à l'aide d'un produit tensoriel avec l'identité (voir l'exemple B.2)

$$\hat{A}' = \hat{I} \otimes \hat{A}.$$

L'état quantique à deux qubits final peut alors être obtenu en composant les deux portes à deux qubits comme à la figure 2.4b

$$|\psi'\rangle = \hat{B}\hat{A}' |\psi\rangle .$$

Comme pour les portes à un qubit (voir la section B.5), on peut composer des portes à deux qubits pour obtenir une porte quantique équivalente (figure 2.4c) qui, lorsqu'appliquée à l'état $|\psi\rangle$, donne directement $|\psi'\rangle$. Cette porte est construite grâce au produit matriciel

$$\hat{C} = \hat{B}\hat{A}'$$

de sorte que

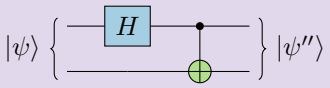
$$|\psi'\rangle = \hat{C} |\psi\rangle .$$

Bien qu'on ait ici réussi à composer deux portes à un et deux qubits respectivement, la même approche pourra être appliquée afin de composer des portes quantiques agissant sur des nombres différents de qubits. La stratégie sera toujours d'utiliser le produit tensoriel avec l'identité afin d'équilibrer le nombre de qubits de deux portes.

On constate qu'il est toujours possible de composer les portes quantiques entre elles pour combiner leurs actions en une seule porte quantique. Ultimement, il est toujours possible de résumer l'effet de la portion unitaire d'un circuit quantique de n qubits comme une seule porte quantique à n qubits.

Exemple B.3 : Composition de portes à un et deux qubits

Voyons comment on peut combiner les portes du circuit présenté à la figure 2.6b pour obtenir la matrice qui représente l'application de celui-ci.



On obtient d'abord la porte à deux qubits équivalente à l'application de la porte Hadamard au premier qubit. On effectue donc le produit tensoriel suivant

$$\hat{I} \otimes \hat{H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

La porte quantique à deux qubits équivalente au circuit complet est obtenue en effectuant le produit matriciel entre cette dernière et la matrice de la porte CNOT. On obtient ainsi,

$$C\hat{X} \times \left(\hat{I}\hat{H}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

C Circuits quantiques

Du moment qu'on a accès à au moins deux qubits sur lesquels on peut appliquer des portes à un ou deux qubits, il devient intéressant de construire des circuits quantiques. La figure 2.6 illustre des circuits quantiques très simples qui n'impliquent que deux qubits.

De manière plus générale, un circuit quantique est une séquence de portes quantiques qui modifie l'état d'un système de plusieurs qubits. On l'illustre d'abord comme une série de lignes horizontales, chacune représentant un qubit, sur lesquelles des portes quantiques sont appliquées en utilisant les représentations diagrammatiques introduites aux sections B.2 et B.1. Lors de l'exécution d'un tel circuit les opérations qui sont appliquées sur les qubits de la gauche vers la droite. L'état initial des qubits (à l'extrême gauche) est parfois spécifié. Dans le cas contraire, on suppose généralement que tous les qubits sont initialement dans l'état $|0\rangle$. En règle générale, les qubits sont mesurés à la fin du circuit (à l'extrême droite). Parfois, seulement un sous-ensemble de tous les qubits est mesuré.

C.1 Effet d'un circuit quantique

Lors de l'éxécution d'un circuit quantique, les différentes portes quantiques sont appliquées au système de qubits pour produire un certain état quantique qui pourra ensuite être mesuré. Pour connaitre l'état quantique juste avant la mesure, il est nécessaire d'appliquer les différentes portes quantiques à partir de l'état quantique initial. L'exemple suivant démontre comment obtenir l'état quantique produit par le circuit de la figure 2.6b.

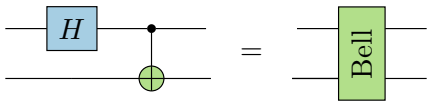


FIGURE 2.5 – Encapsulation du circuit quantique de préparation des états de Bell en une porte à deux qubits.

Exemple C.1 : L'effet d'un circuit quantique

À priori, l'état quantique initial pour le circuit à la figure 2.6b est l'état $|00\rangle$, ce qui correspond, dans la base computationnelle au vecteur d'état

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

La matrice qui représente l'action de ce circuit a été construite à l'exemple B.3. L'état quantique qui est produit par ce circuit s'obtient en effectuant le produit

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

L'état quantique ainsi produit peut également s'écrire comme

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle).$$

Exercice C.1 : Préparation des quatre états de Bell

Montrez qu'il est possible de préparer les quatre états de Bell (équation 2.10) en appliquant le circuit quantique de la figure 2.6b aux quatre états de base à deux qubits.

C.2 Représentation matricielle

Les circuits quantiques utilisés dans les algorithmes quantiques sont généralement assez complexes. Pour aider à leur construction et les rendre plus faciles à comprendre, ils peuvent être décomposés en plusieurs circuits quantiques sous la forme de sous-routines. Il est alors pratique d'encapsuler ces sous-routines sous la forme de portes quantiques à plusieurs qubits. Ces sous-routines peuvent faire intervenir tous les qubits ou seulement un sous-ensemble.

Pour ces circuits quantiques de sous-routines, l'état initial des qubits n'est généralement pas spécifié, car il dépend du reste du circuit qui le précède. Également, à moins qu'il ne s'agisse d'une sous-routine de mesure, un tel circuit ne comporte pas de mesure à la fin. Par exemple, le circuit de préparation de paires de Bell peut être encapsulé dans une porte à deux qubits, comme c'est illustré à la figure 2.5.

C.3 Quelques circuits quantiques à deux qubits

Introduisons deux circuits quantiques notables, soit le circuit de préparation de superposition uniforme et le circuit de préparation de paires de Bell.

(a) (b)

FIGURE 2.6 – Circuits quantiques à deux qubits notables : (a) préparation d'une superposition uniforme à deux qubits, (b) préparation d'une paire de Bell.

Circuit de superposition uniforme

On a introduit, à la section A.6, l'état de superposition uniforme à deux qubits. Le circuit qui permet de préparer cet état à partir de l'état initial $|00\rangle$ est illustré à la figure 2.6a. On constate que chaque qubit est alors placé dans l'état $|+\rangle$ et que l'état de superposition uniforme à deux qubits est l'état produit $|+\rangle \otimes |+\rangle$.

Nous allons voir au chapitre suivant que ce circuit se généralise facilement à plus de deux qubits et permet toujours de préparer une superposition uniforme de tous les états de base pour des systèmes de n qubits.

Exercice C.2 : Superposition uniforme à deux qubits

a) Construisez la matrice 4×4 qui représente l'effet du circuit de préparation d'une superposition uniforme à deux qubits (figure 2.6a).

b) Montrez que son application à l'état initial $|00\rangle$ permet de préparer l'état de superposition uniforme à deux qubits.

c) Comment diffère l'état préparé si l'état initial est un autre état de base à deux qubits ($|01\rangle$, $|10\rangle$ ou $|11\rangle$) ?

Circuit de préparation de paires de Bell

Nous avons déjà introduit le circuit de préparation de paires de Bell, reproduit à la figure 2.6b. En utilisant ce circuit à partir d'un des quatre états de base à deux qubits, on arrive à préparer respectivement un des quatre états de Bell (voir équation 2.10). Ce circuit peut donc être vu comme une transformation depuis les états de base à deux qubits vers les états de Bell

$$|00\rangle \to \left|\Phi^+\right\rangle \qquad |01\rangle \to \left|\Phi^-\right\rangle$$
$$|10\rangle \to \left|\Psi^+\right\rangle \qquad |11\rangle \to \left|\Psi^-\right\rangle .$$

Exercice C.3 : Circuit de Bell inverse

Trouvez le circuit quantique qui permet de transformer les états de Bell en états de base à deux qubits tel que

$$\left|\Phi^+\right\rangle \to |00\rangle \qquad \left|\Phi^-\right\rangle \to |01\rangle$$
$$\left|\Psi^+\right\rangle \to |10\rangle \qquad \left|\Psi^-\right\rangle \to |11\rangle .$$

S Solutions aux exercices

Exercice A.3 : Probabilités pour un état produit

Pour vérifier qu'un état produit décrit bien un système de deux qubits indépendants, on peut vérifier que les probabilités d'obtenir les différents résultats lors des mesures des deux qubits sont cohérentes .

Par exemple, calculons la probabilité d'observer les deux qubits dans l'état 0. D'abord les probabilités d'obtenir 0 pour chacun des qubits isolés sont

$$p_0^{(a)} = |a_0|^2 \quad \text{et} \quad p_0^{(b)} = |b_0|^2.$$

La probabilité d'obtenir ces deux résultats est le produit de ces probabilités

$$p_{00} = p_0^{(b)} p_0^{(a)} = |b_0|^2 |a_0|^2 = |b_0 a_0|^2$$

ce qui correspond bien à la probabilité d'obtenir l'état $|00\rangle$ pour l'état produit de deux qubits à l'équation 2.7. De manière analogue, les probabilités d'obtenir les trois autres résultats possibles sont bien

$$p_{01} = |b_0 a_1|^2, \quad p_{10} = |b_1 a_0|^2 \quad \text{et} \quad p_{11} = |b_1 a_1|^2.$$

L'état produit de l'équation 2.7 permet donc d'obtenir les mêmes probabilités de mesure que si on considère les 2 qubits indépendamment.

Exercice A.5 : Factorisation impossible

La factorisation de l'état 2.9 dans des états à 1 qubit $|a\rangle$ et $|b\rangle$ impliquerait de pouvoir résoudre les équations suivantes

$$a_0 b_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad a_1 b_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$
$$a_0 b_1 = 0 \qquad a_1 b_0 = 0.$$

Les équations du haut nécessitent qu'aucune composante ne soit nulle, alors que les équations du bas impliquent qu'au moins 2 d'entre elles soient nulles !

Exercice B.4 : Produits tensoriels de portes quantiques

(a)

$$\hat{X}\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & 1 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ 1 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & 0 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(b)

$$\hat{Z}\hat{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & 0 \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ 0 \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & -1 \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(c)

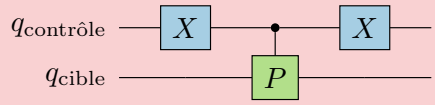
$$\hat{Z}\hat{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & 0 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ 0 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & -1 \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

(d)

$$\hat{H}\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\times\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} & 1\times\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\\ 1\times\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} & -1\times\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ 1 & -1 & 1 & -1\\ 1 & 1 & -1 & -1\\ 1 & -1 & -1 & 1\end{pmatrix}$$

Exercice B.2 : Porte controlée par $|0\rangle$

En appliquant des portes $\hat{X}$ sur le qubit de contrôle avant et après la porte contrôlée, on produit une porte contrôlée par l'état $|0\rangle$.



Chapitre 3

Plus de deux qubits

Les outils développés au chapitre 2 se généralisent naturellement pour des systèmes de plus de deux qubits.

Il peut parfois devenir encombrant de travailler et de manipuler des états à plusieurs qubits. Afin de nous aider dans cette tâche, il est pertinent de définir un certain nombre de notations utiles et judicieuses.

A État à n qubits

Un ordinateur quantique à deux qubits est certainement une machine intéressante à étudier d'un point de vue expérimental ou théorique, mais en pratique une telle machine n'est pas très utile. Pour être en mesure d'aborder des problèmes d'intérêt, un ordinateur quantique devrait comporter au moins plusieurs dizaines, centaines ou milliers de qubits, voir plus. Considérant que les processeurs classiques actuels comportent plusieurs milliards de transistors, il est difficile de prédire combien de qubits auront les ordinateurs quantiques dans le futur.

Dans tous les cas, nous aurons besoin d'outils mathématiques efficaces et clairs pour décrire l'état de tels systèmes. Les notations choisies devraient aussi être applicables à des systèmes de dix ou un milliard de qubits.

A.1 Pour $n = 3$

Afin de faciliter la généralisation vers un état quantique à n qubits, recommençons la procédure du début de la section 2.A, mais cette fois pour trois ($n = 3$) qubits. La mesure de trois qubits dans des états quantiques quelconques peut possiblement retourner un des huit résultats suivants

$$000, \quad 001, \quad 010, \quad 011, \quad 100, \quad 101, \quad 110 \quad \text{ou} \quad 111.$$

On définit donc une base pour les états quantiques à trois qubits

$$|000\rangle, \quad |001\rangle, \quad |010\rangle, \quad |011\rangle, \quad |100\rangle, \quad |101\rangle, \quad |110\rangle \quad \text{et} \quad |111\rangle.$$

qui nous permet d'écrire un état quantique général à trois qubits comme une combinaison linéaire de ces états de base

$$|\psi\rangle = \alpha\,|000\rangle + \beta\,|001\rangle + \gamma\,|010\rangle + \delta\,|011\rangle + \epsilon\,|100\rangle + \zeta\,|101\rangle + \eta\,|110\rangle + \theta\,|111\rangle. \tag{3.1}$$

On constate qu'avec seulement trois qubits l'écriture d'un état quantique commence déjà à être encombrante ! Pour alléger un peu l'écriture, il serait intéressant d'exprimer un état $|\psi\rangle$ comme une somme $\sum(\cdot)$. Pour ce faire, on doit d'abord pouvoir étiqueter ces 8 états de base clairement. Pour l'instant, les états de base sont étiquetés de la manière suivante

$$|b_2 b_1 b_0\rangle$$

$b_2 b_1 b_0$	j
0 0 0	0
0 0 1	1
0 1 0	2
0 1 1	3
1 0 0	4
1 0 1	5
1 1 0	6
1 1 1	7

TABLE 3.1 – Représentations binaires et décimales des 8 premiers entiers.

où les bits b_j peuvent prendre les valeurs 0 ou 1. Ces étiquettes sont en fait des chaines de bits qui correspondent aux représentations binaires des entiers de 0 à 7. Le tableau 3.1 illustre cette correspondance. Chacun de ces entiers peut être obtenu grâce à une somme sur les trois premières puissances de 2 pondérées par les trois bits

$$j = \sum_{q=0}^{2} 2^q b_q.$$

Pour un système de trois qubits, on peut donc écrire un état quantique générale comme une somme sur huit termes

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{7} \alpha_j |j\rangle \tag{3.2}$$

où les huit composantes α, β, ..., θ de l'équation 3.1, sont remplacées par α_0, α_1, ..., α_7 et donc, sous une forme générale, par α_j.

A.2 Forme générale

Pour généraliser l'équation 3.2 à un nombre arbitraire de qubits on peut d'abord identifier combien de termes une telle somme devrait comporter. On sait que pour un, deux et trois qubits les nombres d'états de base sont respectivement deux, quatre et huit : il double à chaque qubit supplémentaire. Le nombre d'états de base pour un système de n qubits est donc

$$N = 2^n. \tag{3.3}$$

En effet, en ajoutant un qubit à un système de n qubits, la nouvelle base d'états comporte tous les 2^n états de la base à n qubits augmentés de l'état $|0\rangle$ du nouveau qubit auxquels on ajoute un nombre égal d'états de base augmentés de l'état $|1\rangle$ du nouveau qubit.

Par exemple, au tableau 3.1, si on se concentre sur les bits b_0 et b_1 des quatre premières lignes et qu'on les compare à leurs valeurs sur les quatre dernières lignes, on constate qu'il s'agit des mêmes séquences. La différence entre ces deux groupes de lignes est la valeur de b_2.

On voit donc que chaque qubit double le nombre d'états de base, ce qui justifie l'équation 3.3. L'état quantique général à n qubits comporte donc 2^n termes. Les états de base à n qubits peuvent être construits grâce au produit tensoriel de n états à un qubit ce qui s'écrit

$$|b_{n-1}\rangle \otimes \cdots \otimes |b_1\rangle \otimes |b_0\rangle = |b_{n-1} \cdots b_1 b_0\rangle = \bigotimes_{q=0}^{n-1} |b_q\rangle$$

où $\bigotimes$ joue un rôle similaire à celui du produit $\prod$, mais pour le produit tensoriel.

Encore une fois, on peut étiqueter ces états plus succinctement en interprétant les chaines de n bits comme des entiers compris entre 0 à $2^n - 1$. Ainsi, les états de base peuvent être identifiés comme

$$|j\rangle = \bigotimes_{q=0}^{n-1} |b_q\rangle \quad \text{avec les entiers} \quad j = \sum_{q=0}^{n-1} 2^q b_q.$$

L'expression générale pour un état quantique de n qubits peut donc finalement prendre la forme suivante

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{2^n-1} \alpha_j |j\rangle \tag{3.4}$$

où la somme s'arrête à $2^n - 1$ car elle commence à 0. Comme tous les états quantiques, ses composantes sont soumises à une condition de normalisation. Pour un état à n qubits, cette condition est

$$\sum_{j=0}^{2^n-1} |\alpha_j|^2 = 1.$$

A.3 États quantiques notables

Comme il y a un nombre exponentiellement grand d'états quantiques possibles pour n qubits, il devient difficile d'en identifier des plus notables que d'autres. On va néanmoins en présenter quelques-uns qui nous permettront d'introduire les notations utilisées lorsqu'on considère un nombre arbitraire de qubits.

L'état du vide

L'état initial d'un circuit quantique, où tous les qubits sont dans l'état $|0\rangle$, est aussi appelé l'état du vide. On peut le noter de plusieurs manières différentes

$$|\mathbf{0}\rangle = |0\rangle^{\otimes n} = |0 \dots 00\rangle = |0\rangle_{n-1} \otimes \cdots \otimes |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_0 .$$

Info notation A.1 : Exposant tensoriel

De la même manière qu'un produit répété peut s'écrire plus brièvement grâce à un exposant

$$2 \times 2 \times \cdots \times 2 = 2^n$$

un produit tensoriel répété peut être écrit comme

$$|0\rangle_{n-1} \otimes \cdots \otimes |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_0 = |0\rangle^{\otimes n} .$$

Le vecteur d'état de l'état du vide est toujours le produit états de base dont seule la première composante est non-nulle

$$|\mathbf{0}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

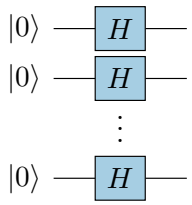


FIGURE 3.1 – Circuit de préparation d'un état de superposition uniforme à n qubits.

L'état de superposition uniforme

On déjà vu l'état de superposition uniforme pour deux qubits à la section A.6. Cet état se généralise pour n qubits et peut être préparé à l'aide du circuit illustré à la figure 3.1. L'application d'une porte Hadamard sur chaque qubit, le place dans l'état $|+\rangle$ et on écrit cet état comme

$$|+\rangle^{\otimes n} = |+\rangle_{n-1} \otimes \cdots \otimes |+\rangle_1 \otimes |+\rangle_0 .$$

Le produit tensoriel de plusieurs états $|+\rangle$ fait alors intervenir tous les états de base.

Exemple A.1 : Superposition uniforme à trois qubits

Illustrons que le produit tensoriel de trois états $|+\rangle$ génère un état qui fait intervenir tous les états de base pour trois qubits. D'abord, écrivons explicitement

$$|+\rangle^{\otimes 3} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle).$$

En distribuant les produits tensoriels on obtient alors,

$$|+\rangle^{\otimes 3} = \frac{1}{\sqrt{2^3}}(|000\rangle + |001\rangle + |010\rangle + |011\rangle + |100\rangle + |101\rangle + |110\rangle + |111\rangle).$$

Le vecteur d'état d'un tel état quantique a donc toutes ses composantes non-nulles et égales. Ce vecteur d'état doit cependant comporté la facteur commun qui assure la normalisation de l'état

$$|+\rangle^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

L'annexe A.1 présente une démonstration générale de la préparation d'un état de superposition uniforme à n qubits à l'aide d'une transformation Hadamard à n qubits.

L'état GHZ

L'état Greenberger–Horne–Zeilinger (GHZ) est un état quantique enchevêtré qui implique au moins trois qubits. Il fait intervenir deux états de base, celui où tous les qubits sont dans l'état $|0\rangle$ et celui où tous les qubits sont dans l'état $|1\rangle$. Pour un système de trois qubit, il s'écrit

$$|\text{GHZ}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |111\rangle)$$

alors que sa forme générale à n qubits est

$$|\text{GHZ}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|0\rangle^{\otimes n} + |1\rangle^{\otimes n}\big).$$

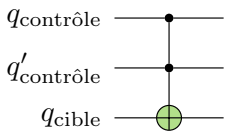


FIGURE 3.2 – La porte Toffoli

Exercice A.1 : État GHZ

a) Écrivez le vecteur d'état pour l'état GHZ à trois qubits.

b) Construisez un circuit quantique qui permet de préparer un état GHZ à trois qubits.

c) Généralisez vos réponses aux deux questions précédentes pour un système de n qubits.

L'état W

L'état W (Wolfgang Dür) est également un état quantique enchevêtré à trois qubits. Il apparait comme une combinaison des états quantiques où un seul qubit est dans l'état $|1\rangle$

$$|\mathrm{W}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle).$$

Cet état se généralise également à un nombre arbitraire de qubits qui s'écrit alors

$$|\mathrm{W}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}(|0\ldots01\rangle + |0\ldots10\rangle + \ldots + |1\ldots00\rangle).$$

Exercice A.2 : État W

a) Montrez que l'état W à n qubit est normalisé.

b) Construisez un circuit quantique qui prépare l'état W à trois qubits. Indice : commencez par une rotation à un qubit qui prépare une superposition qui à 1/3 des chances d'être mesuré dans un état et 1/3 des chances d'être mesuré dans l'autre.

B Portes quantiques à plus de deux qubits

La plus part des portes quantiques à trois qubit ou plus sont généralement des portes quantiques construitent en assemblant plusieurs portes à un ou deux qubits. On en distingue plusieurs types, comme des portes contrôlées par plusieurs qubits ou encore des versions contrôlées de portes à plusieurs qubits. Il existe néanmoins au moins une porte quantique à trois qubits qui se démarque : la porte Toffoli.

Toffoli

La porte Toffoli, aussi appelée porte contrôle-contrôle-$\hat{X}$ est une porte quantique contrôlée par deux qubits. Une porte $\hat{X}$ est appliquée sur le qubit cible si les deux qubits de contrôle sont dans l'état $|11\rangle$. Une porte Toffoli est illustrée à la figure 3.2.

Exercice B.1 : Porte Toffoli

En énumérant comment la porte Toffoli affecte les huit états de base d'un système de trois qubits, construissez la matrice 8×8 qui représente l'application d'une porte Toffoli.

C Circuits quantiques et calcul quantique

Abordons maintenant comment un circuit quantique peut être utilisé pour effectué un calcul quantique. Nous allons séparer le circuit quantique est deux sections : la transformation unitaire et la mesure.

C.1 Transformation unitaire

La transformation unitaire $\hat{U}$ d'un circuit quantique qui agit sur n qubits transforme l'état initial du système vers un état quantique donné

$$|\psi\rangle = \hat{U}\,|\mathbf{0}\rangle \tag{3.5}$$

L'état ainsi préparé peut être représenté par un vecteur d'état comportant 2^n composantes

$$|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{2^n-1} \alpha_j\,|j\rangle\,. \tag{3.6}$$

Ultimement, la transformation unitaire représente donc une opération mathématique équivalente à la multiplication d'une matrice de dimensions $2^n \times 2^n$ sur un vecteur d'état de 2^n composantes pour générer une nouveau vecteur d'état de 2^n composantes

$$\begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{2^n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{00} & U_{01} & \cdots & U_{0,2^n-1} \\ U_{10} & U_{11} & \cdots & U_{1,2^n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ U_{2^n-1,0} & U_{2^n-1,1} & \cdots & U_{2^n-1,2^n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Remarque : Simuler un ordinateur quantique

Pour simuler un circuit quantique de n qubits à l'aide d'un ordinateur classique, il est nécessaire de construire une matrice de dimensions $2^n \times 2^n$ et d'effectuer une multiplication entre celle-ci et un vecteur d'état de 2^n composantes.

Pour un circuit quantique de trois qubits, cela correspond à une matrice de $8 \times 8 = 64$ éléments. Simuler cela n'a rien d'extraordinaire. Cependant, pour un système qui comporte 20 qubits, la matrice correspondante comporte

$$2^{20} \times 2^{20} = 1\,048\,576 \times 1\,048\,576$$

éléments, soit un peu plus de mille milliards d'éléments ! Pour 150 qubits, ce nombre dépasse le nombre estimé d'atomes contenus dans l'univers ! Il apparait alors évident qu'il est très difficile, voir impossible, de simuler à l'aide d'un ordinateur classique la transformation unitaire effectuée par un ordinateur quantique de taille raisonnable.

Insistons sur le fait que l'ordinateur quantique ne construit pas cette matrice et n'effectue pas un produit, mais effectue une opération équivalente. Le résultat est alors contenu dans le vecteur qui décrit l'état du système. Ce vecteur d'état n'est pas *parfaitement accessible* en pratique, c'est-à-dire qu'on ne peut pas le connaitre en détail avec une précision infinie. On ne peut acquérir qu'une quantité d'information limitée sur celui-ci en effectuant une série de mesures.

C.2 Mesure

Une fois la transformation unitaire appliquée, le système est dans l'état $|\psi\rangle$. La mesure de chacun des qubits retournera un bit soit un 0 soit un 1. La chaine de bits obtenue en assemblant ces valeurs peut être interprêtée comme un entier j. La probabilité d'obtenir la chaine de bits associée à l'entier j est déterminé par l'état quantique du système avant la mesure (équation 3.6) et est directement donnée par la règle de Born

$$p_j = |\alpha_j|^2.$$

Qu'a-t-on appris après cette mesure ? Très peu ! Tout ce que l'on sait et que l'état $|j\rangle$ est un des résultats possibles, c'est-à-dire qu'il fait partie de la combinaison linéaire qui compose l'état préparé $|\psi\rangle$ (équation 3.6). On ne sait pas si ce résultat est très probable, peu probable, etc. On sait aussi que le système de qubits est maintenant dans l'état $|j\rangle$ à cause de l'effet projectif de la mesure.

Pour acquérir plus d'information sur l'état $|\psi\rangle$ on doit donc repartir de zéro, reconstruire l'état à l'aide de la transformation unitaire et le mesurer à nouveau, et répéter ces étapes un très grand nombre de fois. Le nombre de répétitions (*shots* en anglais) est un paramètre important lorsqu'on lance un calcul quantique.

Il est alors possible d'accumuler des statistiques qui nous informe sur l'état $|\psi\rangle$. Par exemple, certains algorithmes sont construits de manière à ce qu'un résultat soit obtenu beaucoup plus souvent que les autres. D'autres algortihmes utilisent tous les résultats obtenu pour calculer une valeur moyenne. Tout cela dépend du type de problème et du type d'algorithme qu'on utilise pour tenter de le résoudre.

S Solutions aux exercices

Exercice B.1 : Porte Toffoli

La porte Toffoli inverse l'état du troisième qubit si les deux premiers sont dans l'état $|11\rangle$. Ainsi les deux états suivants sont échangés sous l'effet d'une porte Toffoli

$$|011\rangle \leftrightarrow |111\rangle$$

alors que tous les autres restent inchangés. Dans la base à huit états (0 à 7) pour une système de trois qubits ces états correspondent aux états 3 et 7. La matrice qui représente la porte Toffoli est donc

$$\text{Toffoli} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Chapitre 4

Mesures et observables (en rédaction)

Jusqu'à maintenant, nous avons abordé la mesure d'un système quantique uniquement via la mesure des qubits dans la base computationnelle. En d'autres mots, la mesure d'un qubit retourne un 0 ou un 1 de manière aléatoire avec des probabilités qui sont données par les amplitudes de probabilités de l'état quantique du système. Nous allons voir que la mesure d'un système quantique peut être beaucoup plus riche que cela à partir du moment où on introduit le concept d'observable.

En mécanique quantique, une observable représente une quantité physique qui peut être observée. Par exemple, la position et l'énergie sont des observables. Jusqu'à maintenant, la seule observable que nous ayons considérée est la valeur du bit (0 ou 1). Dans le contexte du calcul quantique, les observables seront accessibles via la mesure de un ou plusieurs qubits. Elles peuvent être utilisées pour acquérir de l'information sur un système quantique, mais aussi pour calculer certaines quantités.

Nous allons introduire les observables en utilisant une approche axée sur le calcul quantique en tentant d'abord de reconstruire le vecteur d'état pour un qubit dont on ignore l'état. Nous verrons que le concept d'observable émerge naturellement dans ce contexte. Cela nous permettra de nous familiariser avec ce nouveau concept et sa représentation mathématique. Nous élargirons ensuite notre perspective en introduisant les observables à plusieurs qubits qui apparaitront comme nécessaires à la description d'un système de plusieurs qubits. Nous nous intéresserons en particulier à un ensemble d'observables appelées les chaines de Pauli qui peut servir de base pour tous les observables à plusieurs qubits.

Ce n'est qu'une fois ces introductions faites que nous aborderons les observables d'un point de vue plus abstrait et mathématique en établissant leur définition formelle et certaines de leurs propriétés.

A Observables à un qubit

Supposez qu'on vous donne accès à une machine (un circuit quantique) qui peut être utilisée pour préparer un qubit dans un état quantique secret. On vous demande de déterminer quel est l'état quantique $|\psi\rangle$ que cette machine prépare. Pour remplir cette tâche, vous pouvez utiliser cette machine pour préparer cet état, le mesurer et répéter ces étapes autant de fois que vous le désirez.

A.1 Déterminer le vecteur d'état

Ce qu'on cherche à faire est donc de déterminer le vecteur d'état d'un qubit, ou autrement dit, trouver sa position sur la sphère de Bloch. Commençons par tenter de déterminer si l'état quantique se situe dans l'hémisphère nord (proche de $|0\rangle$) ou l'hémisphère sud (proche de $|1\rangle$).

Supposons que l'on mesure l'état secret une première fois et supposons que le résultat de cette mesure est 0. Que vient-on d'apprendre sur l'état secret ? Très peu. Nous savons définitivement que le qubit n'est pas exactement dans l'état $|1\rangle$. En fait, l'état pourrait être à n'importe quel endroit sur la sphère de Bloch, sauf exactement sur $|1\rangle$. À ce stade, il est légèrement plus probable que l'état se situe dans l'hémisphère

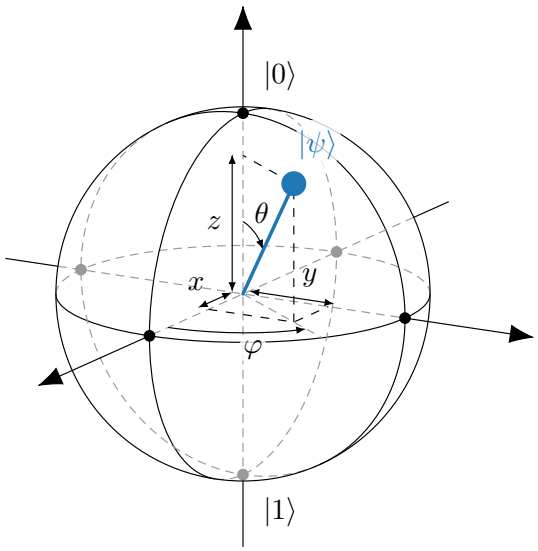


FIGURE 4.1 – Coordonnée x, y et z d'un état quantique sur la sphère de Bloch.

nord que dans l'hémisphère sud. Pour augmenter notre certitude, nous devrons mesurer l'état secret à nouveau.

Supposons que l'on effectue N mesures et que l'on obtienne N_0 fois l'état 0 et N_1 fois l'état 1. Si $N_0 > N_1$, il est raisonnable de croire que l'état se situe dans l'hémisphère nord. Notre niveau de certitude va cependant dépendre de la différence entre les nombres de fois qu'on a obtenu chacun des résultats $N_0 - N_1$.

Par exemple, supposons N égal à 100 pour illustrer notre propos. Si on obtient $N_0 = 95$ (et $N_1 = 5$), nous avons confiance que l'état se situe dans l'hémisphère nord. Par contre, si on obtient $N_0 = 55$ (et $N_1 = 45$), il est fort probable que l'état se situe proche de l'équateur ce qui rend toute conclusion un peu plus hasardeuse.

Si on augmente maintenant le nombre de mesures à 1000 et qu'au final on obtient $N_0 = 550$ (et $N_1 = 450$), la position de l'état est identique au cas $N_0 = 55$ (et $N_1 = 45$), mais notre certitude sur celle-ci est bien meilleure.

La différence normalisée

$$\frac{N_0 - N_1}{N}$$

semble donc être la quantité importante et elle nous informe si l'état sur la sphère de Bloch est plus proche de l'état $|0\rangle$ que de l'état $|1\rangle$. La précision de cette estimation dépend cependant de N.

A.2 Coordonnée en z

Tentons maintenant d'être plus quantitatifs et de déterminer avec précision la coordonnée en z de cet état quantique, comme illustré à la figure 4.1. D'abord, cette coordonnée peut être liée à l'angle θ par trigonométrie

$$z = \cos(\theta). \tag{4.1}$$

Si on peut obtenir l'angle θ, nous aurons directement accès à la coordonnée z via cette relation. Rappelons-nous que l'état quantique d'un qubit est donné par l'équation 1.10

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)\,|0\rangle + e^{i\varphi}\sin(\theta/2)\,|1\rangle\,.$$

Or nous avons vu qu'on peut acquérir de l'information sur l'état quantique en effectuant un grand nombre de mesures sur celui-ci. Cela nous permet d'estimer les valeurs des probabilités p_0 et p_1 qui sont liées à l'angle θ via

$$p_0 = |\langle 0|\psi\rangle|^2 = \cos^2(\theta/2) \quad \text{et} \quad p_1 = |\langle 1|\psi\rangle|^2 = \sin^2(\theta/2).$$

Par trigonométrie, on constate que la quantité importante $p_0 - p_1$ donne directement l'information que l'on recherche

$$p_0 - p_1 = \cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2) = \cos(\theta) = z. \tag{4.2}$$

Donc, si on arrive à extraire les probabilités p_0 et p_1 pour un état quantique à un qubit, on sera capable de déterminer sa coordonnée z sur la sphère de Bloch. Nous continuerons cette discussion à la section A.7.

A.3 Observable $\hat{Z}$

Pour aborder le concept d'observable, réécrivons l'expression de la coordonnée z de la manière suivante

$$z = p_0 - p_1 = |\langle\psi|0\rangle|^2 - |\langle\psi|1\rangle|^2 = \langle\psi|0\rangle\langle 0|\psi\rangle - \langle\psi|1\rangle\langle 1|\psi\rangle\,.$$

En procédant à une mise en évidence de l'état quantique à gauche et à droite, on retrouve l'expression dyadique [1] de la matrice $\hat{Z}$

$$z = \langle\psi|\left(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|\right)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{Z}|\psi\rangle\,.$$

On constate alors que la coordonnée z de l'état quantique peut être exprimée comme le produit $\langle\psi|\hat{Z}|\psi\rangle$. Ici, la matrice $\hat{Z}$ correspond à l'observable $\hat{Z}$. On dit que l'expression

$$z = \langle\psi|\hat{Z}|\psi\rangle\,.$$

correspond au calcul de la *valeur moyenne* de l'*observable* $\hat{Z}$ sur l'état quantique $|\psi\rangle$. Pour un état quantique quelconque $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, cela revient à effectuer le produit matriciel suivant

$$z = \langle\psi|\hat{Z}|\psi\rangle = \begin{pmatrix}\alpha^* & \beta^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = |\alpha|^2 - |\beta|^2$$

ce qui revient bien à l'expression 4.2.

Remarque : Observables, portes et opérateurs

Dans ce chapitre, nous allons manipuler des observables et décrire leurs propriétés. Les observables, comme les opérateurs et les portes quantiques peuvent être représentés par des matrices. Cela implique que plusieurs manipulations mathématiques qui seront présentées ici pourraient également s'appliquer aux opérateurs et aux portes quantiques.

Par exemple, la matrice $\hat{Z}$ peut à la fois représenter un opérateur, une porte quantique et une observable même si ces trois choses sont conceptuellement différentes.

Typiquement, les propriétés des matrices sont d'abord présentées de manière abstraite sous le thème de l'algèbre linéaire et sont ensuite appliquées aux opérateurs, aux observables et aux portes quantiques. Nous tentons ici une approche différente en appliquant directement ces concepts aux observables en espérant que cela permette de se familiariser plus facilement avec ceux-ci. L'abstraction pourra se faire dans un deuxième temps.

1. Consultez la section B.11 si vous avez besoin d'un rafraichissement sur la notation dyadique.

A.4 Observable $\hat{X}$

Afin d'identifier l'état quantique $|\psi\rangle$, nous aurons également besoin de connaitre ses coordonnées x et y. Concentrons-nous sur x pour l'instant. Par analogie avec l'observable $\hat{Z}$, le calcul de la valeur moyenne de l'observable $\hat{X}$ permet d'obtenir la composante x de l'état $|\psi\rangle$ sur la sphère de Bloch. Vérifions cette affirmation en effectuant explicitement ce calcul

$$\begin{aligned} x = \langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle &= \begin{pmatrix}\cos(\theta/2) & e^{-i\varphi}\sin(\theta/2)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos(\theta/2)\\ e^{i\varphi}\sin(\theta/2)\end{pmatrix} \\ &= \sin(\theta/2)\cos(\theta/2)\left(e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}\right) \\ &= \sin(\theta)\cos(\varphi) \end{aligned} \tag{4.3}$$

ce qui correspond effectivement à la coordonnée x (en coordonnées sphériques) de l'état $|\psi\rangle$ sur la sphère de Bloch.

Pour un état quantique quelconque $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, cela revient à effectuer le produit matriciel suivant

$$x = \langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle = \begin{pmatrix}\alpha^* & \beta^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \alpha\beta^* + \alpha^*\beta.$$

A.5 Observable $\hat{Y}$

Un calcul similaire permet de montrer que la valeur moyenne de l'observable $\hat{Y}$ est égale à la coordonnée y de l'état quantique, sur la sphère de Bloch

$$y = \langle\psi|\hat{Y}|\psi\rangle = \sin(\theta)\sin(\varphi). \tag{4.4}$$

A.6 Observable $\hat{I}$

Il est également utile de définir l'observable identité. La valeur moyenne de cette observable est toujours

$$\langle\psi|\hat{I}|\psi\rangle = 1.$$

pour un état normalisé. Il n'est pas nécessaire de mesurer un qubit pour évaluer la valeur moyenne de l'identité sur celui-ci.

A.7 Estimation sur un ordinateur quantique

Nous avons établi qu'on peut exprimer les coordonnées x, y et z d'un état quantique à un qubit comme les valeurs moyennes des observables $\hat{X}$, $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$ sur cet état quantique. Il nous reste cependant à décrire comment on peut utiliser des mesures sur un qubit afin de déduire ses coordonnées x, y et z.

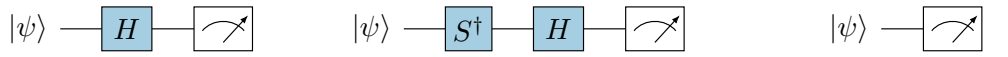
La coordonnée en z

On a déjà vu à l'équation 4.2 que la coordonnée z peut être exprimée comme la différence entre les probabilités d'obtenir 0 et 1 lors de la mesure du qubit

$$z = p_0 - p_1.$$

On peut estimer ces probabilités en effectuant un certain nombre N de mesures. On utilise ensuite le nombre de fois qu'on a obtenu chacun des deux résultats possibles (N_0 et N_1) afin d'estimer les probabilités

$$p_0 \approx \frac{N_0}{N} \quad \text{et} \quad p_1 \approx \frac{N_1}{N}.$$



(a) Mesure de $\hat{X}$ (b) Mesure de $\hat{Y}$ (c) Mesure de $\hat{Z}$

FIGURE 4.2 – Circuits de mesure pour les trois observables à un qubit.

Coordonnée en x

Alors que les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ correspondent respectivement aux coordonnées $z = 1$ et $z = -1$, les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$ correspondent aux coordonnées $x = 1$ et $x = -1$. Imaginons donc qu'on puisse mesurer le qubit d'une manière que les résultats possibles soient $+$ et $-$ au lieu des habituels 0 et 1. Pour un qubit dans un état quantique $|\psi\rangle$, les probabilités d'obtenir chacun de ces résultats se calculent comme d'habitude par la règle de Born

$$p_+ = |\langle +|\psi\rangle|^2 \quad \text{et} \quad p_- = |\langle -|\psi\rangle|^2$$

Par analogie avec la coordonnée z, la coordonnée en x peut alors être exprimée comme

$$x = p_+ - p_-.$$

Certaines architectures d'ordinateur quantique permettent d'effectuer des mesures dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ et ainsi d'évaluer directement ces probabilités. Pour les autres, tout n'est pas perdu. En effet, on peut émuler une mesure dans cette base en modifiant l'état du qubit avant de le mesurer. En effet, on peut utiliser l'identité $\hat{X} = \hat{H}\hat{Z}\hat{H}$ pour écrire

$$x = \langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{H}\hat{Z}\hat{H}|\psi\rangle = \langle\psi^{(x)}|\hat{Z}|\psi^{(x)}\rangle \tag{4.5}$$

où on a défini l'état quantique modifié

$$|\psi^{(x)}\rangle = \hat{H}\,|\psi\rangle\,.$$

On constate donc qu'il est possible d'émuler une mesure selon l'observable $\hat{X}$ sur un état quantique $|\psi\rangle$, en effectuant une mesure selon $\hat{Z}$ sur l'état quantique modifié $|\psi^{(x)}\rangle$, c'est-à-dire en effectuant une mesure *standard* d'un qubit sur lequel on a préalablement appliqué une porte Hadamard. Le circuit de la mesure pour l'observable $\hat{X}$ est donc celui présenté à la figure 4.2a.

La porte Hadamard effectue une transformation qui déplace l'état $|+\rangle$ vers $|0\rangle$ de sorte que la probabilité d'obtenir 0 pour l'état transformé $|\psi^{(x)}\rangle$ est égale à la probabilité d'obtenir $+$ pour l'état initial $|\psi\rangle$. Un raisonnement analogue s'applique pour les états $|-\rangle$ et $|1\rangle$. Cela peut se résumer simplement par

$$p(+|\psi) = p(0|\psi^{(x)}) \qquad\qquad p(-|\psi) = p(1|\psi^{(x)}).$$

où on utilise la notation $p(\phi|\psi)$ pour indiquer la probabilité d'obtenir le résultat ϕ étant donné que l'état du qubit est $|\psi\rangle$.

Remarque

On a utilisé la porte Hadamard pour transformer l'état du qubit avant la mesure, car elle est typiquement plus facile à implémenter en pratique. Cependant, on aurait tout aussi bien pu utiliser une porte $R_y(-\pi/2)$ à la place et obtenir les mêmes résultats.

Coordonnée en y

De manière analogue aux coordonnées z et x, la troisième coordonnée peut être exprimée comme

$$y = p_{+i} - p_{-i}.$$

où les probabilités de mesure dans la $\{|+i\rangle, |-i\rangle\}$ peuvent être obtenues par une mesure émulée dans cette base. Dans ce cas-ci, on utilise l'identité $\hat{Y} = \hat{S}\hat{X}\hat{S}^\dagger$ pour écrire

$$y = \langle\psi|\hat{Y}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{S}\hat{X}\hat{S}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{S}\hat{H}\hat{Z}\hat{H}\hat{S}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi^{(y)}|\hat{Z}|\psi^{(y)}\rangle \tag{4.6}$$

où on a défini l'état quantique modifié

$$|\psi^{(y)}\rangle = \hat{H}\hat{S}^\dagger|\psi\rangle .$$

Cette transformation permet de déplacer les états $|+i\rangle$ et $|-i\rangle$ respectivement vers les états de la base computationnelle $|0\rangle$ et $|1\rangle$. Le circuit de la mesure en $\hat{Y}$ est présenté à la figure 4.2b.

En utilisant la même notation, les probabilités recherchées pour l'état $|\psi\rangle$ peuvent être exprimées grâce aux probabilités de mesure pour l'état modifié

$$p(+i|\psi) = p(0|\psi^{(y)}) \qquad\qquad p(-i|\psi) = p(1|\psi^{(y)}).$$

A.8 Reconstruire le vecteur d'état

Une fois que les coordonnées x, y et z ont été estimées, on devrait être capable d'estimer la position du vecteur d'état sur la sphère de Bloch.

Remarque

Étant donné que les coordonnées ont été estimées, il n'est pas garanti qu'elles respectent la condition de normalisation

$$x^2 + y^2 + z^2 = 1$$

à laquelle on s'attend. On pourrait utiliser un modèle sophistiqué pour exploiter cette relation pour donner plus d'importance aux coordonnées dont l'estimation est plus précise, mais nous ne le ferons pas pour l'instant.

En utilisant les relations 4.1, 4.3 et 4.4 on peut exprimer les angles comme étant

$$\theta = \arccos(z) \quad \text{et} \quad \varphi = \arctan2(y, x).$$

Le vecteur d'état est alors simplement donné par l'équation 1.10, c'est-à-dire

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi}\sin(\theta/2) \end{pmatrix}.$$

A.9 Autres observables à un qubit

En ajoutant la matrice identité $\hat{I}$ aux matrices de Pauli $\hat{X}$, $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$ on forme une base pour toutes les matrices 2×2 à coefficient complexes. Autrement dit, toute matrice 2×2 à coefficients complexes peut être écrite comme une combinaison linéaire

$$\hat{A} = a_i\hat{I} + a_x\hat{X} + a_y\hat{Y} + a_z\hat{Z} \tag{4.7}$$

où les coefficients a_i à a_z sont des nombres complexes. Ces matrices servent donc également de base pour toute observable à un qubit. Nous verrons à la section C.5 que pour que $\hat{A}$ soit une observable, elle doit être Hermitienne, ce qui impose que les coefficients a_i à a_z soient des nombres réels.

Par exemple, l'observable

$$\hat{A}(\theta) = \cos(\theta)\hat{Z} + \sin(\theta)\hat{X}$$

permet de mesurer un qubit selon un axe qui fait un angle θ avec l'axe des z tout en étant dans le plan xz.

La valeur moyenne d'une observable telle que construite à l'équation 4.7 peut être estimée de deux manières.

Première approche

D'abord, on peut l'exprimer comme une combinaison linéaire de valeurs moyennes

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = a_i + a_x \langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle + a_y \langle\psi|\hat{Y}|\psi\rangle + a_z \langle\psi|\hat{Z}|\psi\rangle$$

où on a utilisé le fait que l'état $|\psi\rangle$ est normalisé et donc que $\langle\psi|\hat{I}|\psi\rangle = 1$. Cette approche nécessite donc d'exécuter trois circuits quantiques, un pour chaque observable.

Seconde approche

L'autre approche généralise l'approche utilisée pour estimer les valeurs moyennes de $\hat{X}$ et $\hat{Y}$, c'est-à-dire d'appliquer une transformation qui diagonalise l'observable $\hat{A}$. En théorie, il est possible de trouver une transformation unitaire $\hat{U}$ telle que

$$\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger = \hat{D}$$

où $\hat{D}$ est un opérateur diagonal dans la base computationnelle. Comme $\hat{D}$ est diagonal, on peut toujours l'exprimer comme une combinaison linéaire des observables $\hat{I}$ et $\hat{Z}$

$$\hat{D} = d_i\hat{I} + d_z\hat{Z}.$$

On peut donc écrire la valeur moyenne de l'observable $\hat{A}$ pour un état quantique quelconque, comme

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{D}\hat{U}|\psi\rangle$$

Comme $\hat{U}$ est unitaire, il existe un circuit quantique qui applique cette transformation. En appliquant ce circuit sur un qubit dans l'état $|\psi\rangle$, on prépare l'état transformé

$$|\psi^{(a)}\rangle = \hat{U}\,|\psi\rangle$$

La mesure du qubit après cette transformation permet alors d'estimer la valeur moyenne de l'observable comme étant

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi^{(a)}|\hat{D}|\psi^{(a)}\rangle = d_i + d_z \langle\psi^{(a)}|\hat{Z}|\psi^{(a)}\rangle\,.$$

Cette approche nécessite l'exécution d'un seul circuit, mais requiert de connaitre la transformation $\hat{U}$. Cela s'avère, difficile, voire pratiquement impossible, pour des systèmes de plus grande taille.

Remarque

Notons également que cette approche ne peut pas être utilisée pour faciliter l'estimation du vecteur d'état d'un qubit dans un état quelconque. Pour que ce soit le cas, il faudrait déjà connaitre l'orientation du vecteur d'état sur la sphère de Bloch.

B Observables à plusieurs qubits

À la section précédente, nous avons établi que pour estimer le vecteur d'état d'un qubit, il est nécessaire d'estimer les valeurs moyennes des observables $\{\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}\}$. Si maintenant on considère un système de deux qubits $|q_0\rangle$ et $|q_1\rangle$, on peut appliquer la même recette à chacun d'eux et estimer les valeurs moyennes de leurs observables à un qubit, soient $\{\hat{X}_0, \hat{Y}_0, \hat{Z}_0\}$ et $\{\hat{X}_1, \hat{Y}_1, \hat{Z}_1\}$. Cela ne permet cependant pas de décrire complètement l'état à deux qubits. En effet, un système de deux qubits comporte une richesse supplémentaire qui fait intervenir l'intrication et qui demande d'estimer la valeur moyenne d'observables à deux qubits pour pouvoir le décrire complètement.

On peut construire des observables à deux qubits de la même manière qu'on a construit les premiers états à deux qubits, c'est-à-dire en combinant les espaces des deux qubits à l'aide du produit tensoriel. Par exemple, l'observable

$$\hat{Z}\hat{Z} = \hat{Z}_1 \otimes \hat{Z}_0.$$

est une observable à deux qubits qui permet de caractériser si les deux qubits sont parallèles ou antiparallèles le long de l'axe z.

Remarque

Bien que notre intérêt pour les observables à plusieurs qubits soit motivé par leur importance dans la description de l'état d'un système de plusieurs qubits, nous ne parviendrons pas à remplir cet objectif dans cette section. En effet, cette tâche requiert des notions que nous n'avons pas encore vues.

Exemple B.1 : Valeur moyenne pour des états de base

Pour débuter notre compréhension des observables à deux qubits, calculons les valeurs moyennes de l'observable $\hat{Z}\hat{Z}$ pour les différents états de base à deux qubits. Comme ces observables ainsi que les états de base sont construits à l'aide de produits tensoriels, les valeurs moyennes peuvent être exprimées comme le produit des valeurs moyennes pour des observables à un qubit. Par exemple,

$$\langle 01|\hat{Z}\hat{Z}|01\rangle = (\langle 0| \otimes \langle 1|)(\hat{Z}_1 \otimes \hat{Z}_0)(|0\rangle \otimes |1\rangle) = \langle 0|\hat{Z}|0\rangle \langle 1|\hat{Z}|1\rangle = 1 \times -1 = -1.$$

Les valeurs moyennes pour tous les états de base s'obtiennent de manière similaire et sont

$$\langle 00|\hat{Z}\hat{Z}|00\rangle = 1 \qquad \langle 01|\hat{Z}\hat{Z}|01\rangle = -1 \qquad \langle 10|\hat{Z}\hat{Z}|10\rangle = -1 \qquad \langle 11|\hat{Z}\hat{Z}|11\rangle = 1.$$

On constate que la valeur moyenne de l'observable $\hat{Z}\hat{Z}$ permet en fait de déterminer si, dans l'état de base, les deux qubits sont pareils (00 ou 11 ; valeur moyenne 1) ou s'ils sont différents (01 ou 10 ; valeur moyenne -1).

Cela est toujours valide pour des états tels que les états de Bell

$$\left|\Phi^+\right\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2} \quad \text{et} \quad \left|\Psi^+\right\rangle = (|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}.$$

En effet, on montre facilement que

$$\left\langle\Phi^+\right|\hat{Z}\hat{Z}\left|\Phi^+\right\rangle = 1 \quad \text{et} \quad \left\langle\Psi^+\right|\hat{Z}\hat{Z}\left|\Psi^+\right\rangle = -1.$$

B.1 Les chaines de Pauli

Nous avons vu à la section précédente qu'une observable à un qubit quelconque peut être exprimée comme une combinaison linéaire des opérateurs de Pauli et de l'identité (voir l'équation 4.7). De manière analogue, nous allons voir que les observables à plusieurs qubits peuvent être exprimées à l'aide de chaines de Pauli

Les expressions telles que $\hat{Z}\hat{Z}$ et $\hat{I}\hat{X}$ sont des chaines de Pauli à deux qubits. De manière générale, une chaine de Pauli de longueur n est composée de n opérateurs de Pauli ou l'identité qui s'appliquent sur autant de qubits. Ces opérateurs sont assemblés à l'aide d'un produit tensoriel. De la même manière que les opérateurs $\hat{I}$, $\hat{X}$, $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$ forment une base pour exprimer des observables à 1 qubit, les chaines de Pauli de longueur n forment une base pour exprimer toutes les observables à n qubits.

Formellement, une chaine de Pauli à n qubits est définie comme

$$\hat{\mathcal{P}} = \bigotimes_{q=0}^{n-1} \hat{\sigma}_q \quad \text{avec} \quad \hat{\sigma}_q \in \{\hat{I}_q, \hat{X}_q, \hat{Y}_q, \hat{Z}_q\}.$$

Chaque chaine de Pauli de longueur n peut être représentée dans la base computationnelle par une matrice de taille $2^n \times 2^n$ en appliquant le produit tensoriel comme on l'a fait à la section B.4 du chapitre 2.

Comme chaque élément d'une chaine de Pauli est un opérateur parmi les quatre possibles, il existe donc 4^n chaines de Pauli différentes de longueur n.

B.2 Observables à n qubits

Lorsqu'on affirme que les chaines de Pauli de longueur n constituent une base pour les observables à n qubits, cela signifie que chacune de ces observables $\hat{A}$ peut être exprimée comme une combinaison linéaire de chaines de Pauli

$$\hat{A} = \sum_i a_i \hat{\mathcal{P}}_i$$

où les coefficients a_i doivent être réels pour que $\hat{A}$ soit Hermitien (voir section C.5). Les coefficients a_i (non nuls) définissent en quelque sorte l'observable $\hat{A}$. Cette combinaison linéaire est particulièrement intéressante lorsqu'elle ne fait intervenir qu'un petit sous-ensemble des 4^n chaines de Pauli possibles.

Le calcul de la valeur moyenne d'une telle observable $\hat{A}$ pour un état quantique $|\psi\rangle$ peut se faire en évaluant les valeurs moyennes des chaines de Pauli qui le constituent

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i a_i \langle\psi|\hat{\mathcal{P}}_i|\psi\rangle .$$

Il apparait alors essentiel de pouvoir évaluer les valeurs moyennes de différentes chaines de Pauli.

B.3 Estimation de la valeur moyenne d'une chaine de Pauli

L'évaluation des valeurs moyennes de chaines de Pauli est au centre de l'évaluation de la valeur moyenne d'observables. Afin de pouvoir effectuer une estimation de ces valeurs moyennes en utilisant un ordinateur quantique, nous allons d'abord considérer les chaines de Pauli dites diagonales qui sont directement mesurables sur un ordinateur quantique. Nous généraliserons ensuite aux autres chaines de Pauli.

Chaines de Pauli diagonales

On identifie les chaines de Pauli diagonales comme étant celles qui sont représentées par des matrices diagonales dans la base computationnelle. Ces chaines de Pauli sont faciles à identifier, car elles comportent uniquement des opérateurs $\hat{I}$ et $\hat{Z}$. En effet, on peut facilement se convaincre que le produit tensoriel de matrices diagonales produit toujours une matrice diagonale. En contrepartie, si on inclut au moins une matrice non diagonale dans le produit tensoriel, la matrice résultante ne sera pas diagonale.

On utilisera la notation suivante pour spécifier qu'une chaine de Pauli est diagonale

$$\hat{\mathcal{Z}} = \bigotimes_{q=0}^{n-1} \hat{\sigma}_q \quad \text{avec} \quad \hat{\sigma}_q \in \{\hat{I}_q, \hat{Z}_q\}.$$

De la même manière que la mesure d'un qubit permet d'estimer la valeur moyenne de l'observable $\hat{Z}$, la mesure d'un système de n qubits permet d'estimer les valeurs moyennes de toutes les chaines de Pauli diagonales de longueur n. En effet, comme on va le voir à la section C.2, les états de base à n qubits sont des états propres des chaines de Pauli diagonales de longueur n. Illustrons cela grâce à l'exemple sur deux qubits suivant.

Exemple B.2 : Chaines de Pauli diagonales pour deux qubits

On aimerait estimer les valeurs moyennes des chaines de Pauli diagonales pour un système de deux qubits dans un état quelconque $|\psi\rangle$. En excluant l'observable identité $\hat{I}\hat{I}$, ces observables sont

$$\hat{I}\hat{Z}, \quad \hat{Z}\hat{I} \quad \text{et} \quad \hat{Z}\hat{Z}.$$

Un état à deux qubits est une superposition des états de base à deux qubits $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ et $|11\rangle$. Un tel état

peut donc être écrit sous la forme suivante

$$|\psi\rangle = \sum_{b_0=0}^{1}\sum_{b_1=0}^{1} \alpha_{b_1 b_0}\,|b_1 b_0\rangle$$

où le coefficient $\alpha_{b_1 b_0}$ est l'amplitude de probabilité devant l'état de base $|b_1 b_0\rangle$. Pour traiter les trois observables en même temps, considérons une observable de la forme $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_0$. La valeur moyenne d'une telle observable s'exprime comme

$$\langle\psi|\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_0|\psi\rangle = \left(\sum_{b'_0=0}^{1}\sum_{b'_1=0}^{1} \alpha^*_{b'_1 b'_0}\,\langle b'_1 b'_0|\right)\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_0\left(\sum_{b_0=0}^{1}\sum_{b_1=0}^{1} \alpha_{b_1 b_0}\,|b_1 b_0\rangle\right)$$

où on a pris soin de distinguer les éléments des sommes à gauche et à droite et d'appliquer le complexe conjugué au terme de droite. Chaque état de base étant un état produit, on peut appliquer une approche similaire à celle de l'exemple prédécent pour rassembler les observables et les états associés au même qubit. On obtient ainsi

$$\langle\psi|\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_0|\psi\rangle = \sum_{b'_0=0}^{1}\sum_{b'_1=0}^{1}\sum_{b_0=0}^{1}\sum_{b_1=0}^{1} \alpha^*_{b'_1 b'_0}\alpha_{b_1 b_0}\langle b'_1|\hat{\sigma}_1|b_1\rangle\,\langle b'_0|\hat{\sigma}_0|b_0\rangle$$

Étant donné que $\hat{\sigma}_q \in \{\hat{I}_q, \hat{Z}_q\}$, les expressions $\langle b'_0|\hat{\sigma}_0|b_0\rangle$ et $\langle b'_1|\hat{\sigma}_1|b_1\rangle$ sont des éléments de matrices diagonales. On peut donc les exprimer simplement à l'aide des valeurs moyennes

$$\langle b'_0|\hat{\sigma}_0|b_0\rangle = \langle b_0|\hat{\sigma}_0|b_0\rangle\,\delta_{b_0,b'_0} \quad \text{et} \quad \langle b'_1|\hat{\sigma}_1|b_1\rangle = \langle b_1|\hat{\sigma}_1|b_1\rangle\,\delta_{b_1,b'_1}.$$

On remplace ensuite ces éléments de matrices dans l'expression précédente et on effectue les sommes sur b'_0 et b'_1 pour obtenir

$$\langle\psi|\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_0|\psi\rangle = \sum_{b_0=0}^{1}\sum_{b_1=0}^{1} |\alpha_{b_1 b_0}|^2\,\langle b_1|\hat{\sigma}_1|b_1\rangle\,\langle b_0|\hat{\sigma}_0|b_0\rangle\,. \tag{4.8}$$

On voit donc qu'il est possible de calculer la valeur moyenne d'une observable à deux qubits $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_0$ à partir des valeurs moyennes des observables à un qubit $\hat{\sigma}_0$ et $\hat{\sigma}_1$. Cela est uniquement possible parce que les observables impliquées sont diagonales dans la base computationnelle.

Appliquons l'expression 4.8 à l'observable $\hat{Z}\hat{Z}$. Comme les valeurs moyennes de l'observable $\hat{Z}$ sur les états de base sont respectivement $+1$ et -1 pour les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$, on peut les écrire

$$\langle b_0|\hat{Z}|b_0\rangle = (-1)^{b_0} \quad \text{et} \quad \langle b_1|\hat{Z}|b_1\rangle = (-1)^{b_1}.$$

La valeur moyenne de l'observable $\hat{Z}\hat{Z}$ devient alors

$$\langle\psi|\hat{Z}\hat{Z}|\psi\rangle = \sum_{b_0=0}^{1}\sum_{b_1=0}^{1} p_{b_1 b_0}(-1)^{b_0+b_1}$$

où $p_{b_1 b_0} = |\alpha_{b_1 b_0}|^2$ est la probabilité d'obtenir le résultat $b_1 b_0$ lors de la mesure des qubits. On note au passage que $(-1)^{b_0+b_1}$ correspond à la valeur propre de $\hat{Z}\hat{Z}$ pour l'état $|b_1 b_0\rangle$. En estimant les probabilités de mesure grâce à

$$p_{b_1 b_0} \approx \frac{N_{b_1 b_0}}{N}$$

l'estimation de la valeur moyenne peut être obtenue grâce au calcul suivant

$$\langle\psi|\hat{Z}\hat{Z}|\psi\rangle \approx \frac{N_{00} - N_{01} - N_{10} + N_{11}}{N}$$

Des calculs similaires à partir de l'équation 4.8 permettent d'estimer les valeurs moyennes pour les deux autres observables

$$\langle\psi|\hat{I}\hat{Z}|\psi\rangle \approx \frac{N_{00} - N_{01} + N_{10} - N_{11}}{N} \quad \text{et} \quad \langle\psi|\hat{Z}\hat{I}|\psi\rangle \approx \frac{N_{00} + N_{01} - N_{10} - N_{11}}{N}.$$

Dans l'exemple précédent, on constate que les données recueillies lors de l'exécution du circuit (N_{00}, N_{01}, N_{10} et N_{11}) peuvent être combinées de différentes manières afin de calculer les valeurs moyennes de différentes observables.

Chaines de Pauli non diagonales

Pour pouvoir estimer la valeur moyenne d'une chaine de Pauli non diagonale, c'est-à-dire qui comporte au moins un $\hat{X}$ ou $\hat{Y}$, on devra appliquer une transformation pour la rendre diagonale. De la même manière qu'on a transformé les observables $\hat{X}$ et $\hat{Y}$ vers $\hat{Z}$ pour le cas à un qubit, cela se résume à modifier l'état quantique avant de le mesurer.

La transformation $\hat{U}$ qu'on cherche doit donc transformer une chaine de Pauli $\hat{\mathcal{P}}$ de sorte que

$$\hat{U}\hat{\mathcal{P}}\hat{U}^\dagger = \hat{\mathcal{Z}}$$

où $\hat{\mathcal{Z}}$ est une chaine de Pauli diagonale. Il existe plusieurs transformations qui permettent cela, mais on s'intéresse ici à la méthode la plus simple qui implique uniquement des portes à un qubit. En effet, en s'inspirant de ce qu'on a appris sur la mesure d'observable à un qubit, la transformation $\hat{U}$ peut simplement consister à appliquer les transformations présentées aux équations 4.5 et 4.6, c'est-à-dire

$$\hat{X} = \hat{H}\hat{Z}\hat{H} \quad \text{et} \quad \hat{Y} = \hat{S}\hat{H}\hat{Z}\hat{H}\hat{S}^\dagger$$

sur chacun des qubits de la chaine de Pauli qui possède respectivement un $\hat{X}$ ou un $\hat{Y}$. Le résultat de cette transformation sera une chaine de Pauli diagonale.

Exemple B.3 : Diagonalisation d'une chaine de Pauli

On veut estimer la valeur moyenne de l'observable à quatre qubits suivante

$$\hat{Z}\hat{I}\hat{X}\hat{Y}.$$

Les opérateurs associés aux qubits $|q_0\rangle$ et $|q_1\rangle$ peuvent être transformés grâce à

$$\hat{Y}_0 = \hat{S}_0\hat{H}_0\hat{Z}_0\hat{H}_0\hat{S}_0^\dagger \quad \text{et} \quad \hat{X}_1 = \hat{H}_1\hat{Z}_1\hat{H}_1.$$

On exprime ainsi la valeur moyenne de l'observable en remplaçant ces expressions pour obtenir

$$\langle\psi|\hat{Z}\hat{I}\hat{X}\hat{Y}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{Z}_3\hat{I}_2(\hat{H}_1\hat{Z}_1\hat{H}_1)(\hat{S}_0\hat{H}_0\hat{Z}_0\hat{H}_0\hat{S}_0^\dagger)|\psi\rangle$$

Étant donné que les opérateurs associés à un qubit commutent avec les opérateurs associés aux autres, on peut les réorganiser pour écrire

$$\langle\psi|\hat{Z}\hat{I}\hat{X}\hat{Y}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{H}_1\hat{S}_0\hat{H}_0(\hat{Z}_3\hat{I}_2\hat{Z}_1\hat{Z}_0)\hat{H}_1\hat{H}_0\hat{S}_0^\dagger|\psi\rangle\,.$$

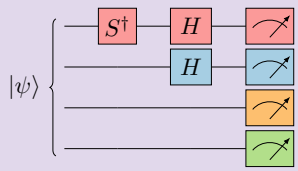
La valeur moyenne pour la chaine de Pauli originale sur l'état quantique $|\psi\rangle$ peut donc être obtenue via la valeur moyenne d'une chaine de Pauli diagonale

$$\langle\psi|\hat{Z}\hat{I}\hat{X}\hat{Y}|\psi\rangle = \langle\psi'|\hat{Z}\hat{I}\hat{Z}\hat{Z}|\psi'\rangle$$

laquelle est évaluée sur l'état quantique modifié qu'on a défini comme

$$|\psi'\rangle = \hat{H}_1\hat{H}_0\hat{S}_0^\dagger\,|\psi\rangle\,.$$

Le circuit de mesure qui permet l'estimation de la valeur moyenne de la chaine de Pauli $\hat{Z}\hat{I}\hat{X}\hat{Y}$ est donc le suivant.



C Observables en général

Maintenant que nous avons fait un survol pratique, mais introductif aux observables à un ou plusieurs qubits, il est pertinent d'établir plus formellement la définition d'une observable ainsi que ses propriétés. Dans cette section, nous allons considérer une observable quelconque $\hat{A}$. Nous établirons d'abord les conséquences liées au fait que la mesure d'une observable soit projective, c'est-à-dire que la mesure projette le système quantique dans un état quantique associé au résultat obtenu. Cela nous amènera à introduire les concepts d'états propres et de valeurs propres pour une observable. Nous poursuivrons la discussion en établissant quelques propriétés importantes des observables.

C.1 Mesures projectives

Nous avons présenté aux sections A.6 et A.7 du chapitre 1 le concept de mesure projective sans nécessairement le nommer. Comme son nom l'indique, une mesure projective projette un système quantique vers l'état quantique associé au résultat obtenu. Nous avons également vu que si on répète la mesure d'un système, le résultat restera inchangé à moins qu'on altère le système entre deux mesures ou qu'on effectue une mesure différente. Nous allons montrer dans cette section que cela implique que les états vers lesquels le système peut être projeté par la mesure sont orthogonaux et forment une base.

Projecteurs

Afin de mieux décrire l'effet de la mesure, nous aurons besoin de définir des projecteurs. Introduisons ceux-ci grâce à un exemple familier.

Exemple C.1 : Projecteurs et mesure d'un qubit

Lorsqu'un qubit dans un état quantique quelconque $|\psi\rangle$ est mesuré, les deux résultats qu'on peut obtenir sont 0 et 1. En fonction du résultat obtenu, l'état du qubit, après la mesure, est respectivement $|0\rangle$ ou $|1\rangle$. Pour représenter mathématiquement cette projection, on peut utiliser les projecteurs qui sont définis comme

$$\hat{P}_0 = |0\rangle\langle 0| \quad \text{et} \quad \hat{P}_1 = |1\rangle\langle 1|\,.$$

Par exemple, l'action du projecteur $\hat{P}_0$ sur l'état $|\psi\rangle$ produit un état qui s'apparente à l'état $|0\rangle$

$$\hat{P}_0\,|\psi\rangle = |0\rangle\,\langle 0|\psi\rangle \propto |0\rangle$$

à l'exception qu'il n'est pas normalisé. En effet, l'état $\hat{P}_0\,|\psi\rangle$ fait intervenir un facteur $\langle 0|\psi\rangle$. On peut normaliser l'état résultant en le divisant par sa norme (voir l'équation 1.6 chapitre 1) et ainsi obtenir

$$|0\rangle = \frac{\hat{P}_0\,|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_0^\dagger\hat{P}_0|\psi\rangle}}.$$

Ainsi, à l'aide du projecteur $\hat{P}_0$ on est capable de représenter l'effet de la mesure sur l'état quantique étant donné le résultat de cette mesure. Notons que l'opération appliquée à l'état $|\psi\rangle$ pour produire l'état résultant $|0\rangle$ n'est manifestement pas linéaire, ce qui traduit bien le fait que la mesure d'un système quantique n'est pas un phénomène linéaire.

Considérons maintenant la mesure d'une observable quelconque $\hat{A}$. Pour l'instant, on ne s'intéresse pas aux résultats de la mesure en tant que tels, mais plutôt à l'état résultant. Il existe un certain nombre d'états quantiques vers lesquels le système peut être projeté lors de la mesure de l'observable $\hat{A}$. Notons ces états $|\phi_j\rangle$ où l'indice j sert à les identifier. Le projecteur associé à chacun de ces états est défini comme

$$\hat{P}_j = |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\,.$$

Les principales caractéristiques d'un projecteur sont qu'il est Hermitien ($\hat{P}_j^\dagger = \hat{P}_j$) et idempotent, c'est-à-dire que l'application d'un projecteur sur lui-même retourne le même projecteur

$$\hat{P}_j\hat{P}_j = |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\phi_j\rangle\langle\phi_j| = |\phi_j\rangle\langle\phi_j| = \hat{P}_j.$$

Mesures projectives

Supposons que le système était initialement dans un état quelconque $|\psi\rangle$ et qu'à la suite d'une première mesure celui-ci est projeté dans l'état $|\phi_j\rangle$. On peut écrire l'état résultant normalisé grâce à son projecteur $\hat{P}_j$ comme étant

$$|\phi_j\rangle = \frac{\hat{P}_j\,|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_j^\dagger\hat{P}_j|\psi\rangle}}.$$

Il est alors intéressant de calculer la probabilité d'obtenir différents résultats en effectuant une seconde mesure subséquente à la première. On écrit $p(\phi_k|\phi_j)$ la probabilité que le système soit projeté dans l'état $|\phi_k\rangle$ lors d'une seconde mesure étant donné que celui-ci a été projeté dans l'état $|\phi_j\rangle$ lors de la première mesure. Cette probabilité se calcule ainsi

$$p(\phi_k|\phi_j) = |\langle\phi_k|\phi_j\rangle|^2 = \frac{|\langle\phi_k|\hat{P}_j|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\hat{P}_j^\dagger\hat{P}_j|\psi\rangle}.$$

Or, des mesures subséquentes d'un même système devraient toujours retourner le même résultat. Ainsi cette probabilité devrait être nulle si k et j sont différents. En revanche, cette probabilité devrait être de 100% si $k = j$. On résume cela avec l'équation suivante

$$p(\phi_k|\phi_j) = \frac{|\langle\phi_k|\hat{P}_j|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\hat{P}_j^\dagger\hat{P}_j|\psi\rangle} = \delta_{kj}.$$

En remplaçant l'expression du projecteur dans cette dernière équation, on obtient

$$\frac{|\langle\phi_k|\phi_j\rangle\langle\phi_j|\psi\rangle|^2}{|\langle\phi_j|\psi\rangle|^2} = \delta_{kj}.$$

où on a utilisé le fait que l'état $|\phi_j\rangle$ est normalisé. On constate que cette relation est vérifiée pourvu que

$$\langle\phi_k|\phi_j\rangle = \delta_{kj} \tag{4.9}$$

ce qui implique que les états quantiques $|\phi_j\rangle$ et $|\phi_k\rangle$ qui peuvent résulter de la mesure projective sont nécessairement orthogonaux entre eux (ou identiques dans le cas $k = j$).

Ce résultat est central pour la mesure projective. Il implique que les états vers lesquels une mesure peut projeter un système quantique doivent être orthogonaux et forment donc une base. Si ce n'était pas le cas, des mesures successives d'un même système pourraient retourner des résultats différents.

C.2 Équation aux valeurs propres

Les états $|\phi_j\rangle$ associés à l'observable $\hat{A}$, tels qu'introduits à la section précédente, sont nommés les états propres de $\hat{A}$. De manière générale, toute observable $\hat{A}$ est caractérisée par un ensemble d'états propres $\{|\phi_j\rangle\}$. Chaque état propre répond à l'équation aux valeurs propres

$$\hat{A}\,|\phi_j\rangle = \lambda_j\,|\phi_j\rangle \tag{4.10}$$

où λ_j est la valeur propre de l'observable $\hat{A}$ associée à l'état propre $|\phi_j\rangle$. L'indice j sert à énumérer tous les états propres et leurs valeurs propres correspondantes.

Les valeurs propres λ_j correspondent aux résultats possibles lors de la mesure de l'observable $\hat{A}$. À cause de l'effet projectif de la mesure en mécanique quantique, si le résultat de la mesure retourne la valeur λ_j, le système sera alors dans l'état associé $|\phi_j\rangle$ après la mesure [2].

Comme les états $|\phi_j\rangle$ forment une base, on peut appliquer par la gauche un état $\langle\phi_k|$ à l'équation aux valeurs propres 4.10 pour exprimer l'*élément de matrice* de $\hat{A}$ dans la base $\{|\phi_j\rangle\}$ comme étant

$$\langle\phi_k|\hat{A}|\phi_j\rangle = \langle\phi_k|\lambda_j|\phi_j\rangle = \lambda_j\delta_{kj}. \tag{4.11}$$

Ainsi, dans la base des états de propres $\{|\phi_j\rangle\}$ l'observable $\hat{A}$ prend la forme d'une matrice diagonale. Ceci n'a rien d'étonnant, car c'est la définition même de l'équation aux valeurs propres.

Exemple C.2 : Observables $\hat{X}$, $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$

Identifions les valeurs propres et les états de propres des observables $\hat{X}$, $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$ en guise d'exemple.

Pour l'observable $\hat{X}$, les deux états qui se retrouvent sur l'axe x de la sphère de Bloch ($|+\rangle$ et $|-\rangle$) restent inchangés sous l'effet de l'opérateur $\hat{X}$. Ceux-ci répondent donc à l'équation aux valeurs propres de la manière suivante

$$\hat{X}\,|+\rangle = +1\,|+\rangle \quad \text{et} \quad \hat{X}\,|-\rangle = -1\,|-\rangle\,.$$

La valeur propre associée à l'état propre $|+\rangle$ est $+1$, et la valeur propre associée à l'état propre $|-\rangle$ est -1. De manière similaire, les états propres de l'observable $\hat{Y}$ sont les états $|+i\rangle$ et $|-i\rangle$ avec les valeurs propres respectives $+1$ et -1

$$\hat{Y}\,|+i\rangle = +1\,|+i\rangle \quad \text{et} \quad \hat{Y}\,|-i\rangle = -1\,|-i\rangle\,.$$

Finalement, l'observable la plus simple d'entre elles, $\hat{Z}$, est caractérisée par des états propres qui ne sont rien d'autre que les états de la base computationnelle

$$\hat{Z}\,|0\rangle = +1\,|0\rangle \quad \text{et} \quad \hat{Z}\,|1\rangle = -1\,|1\rangle\,.$$

Remarque

L'opérateur $\hat{Z}$ est diagonal dans la base computationnelle, et donc ces états propres sont $|0\rangle$ et $|1\rangle$ par définition. C'est pour cette raison qu'on fait généralement référence à la mesure standard d'un qubit comme étant une mesure en $\hat{Z}$.

C.3 Dégénérescence

Il arrive que deux (ou plusieurs) états propres d'une observable partagent la même valeur propre. On dit alors que cette valeur propre est dégénérée. Dans ce cas, les états propres associés à cette même valeur propre forment un sous-espace. Ainsi, toute combinaison linéaire de ces états propres est également un état propre avec la même valeur.

Cela implique qu'il existe un choix dans la base des états propres de $\hat{A}$ associé à ce sous-espace. La seule condition sur les états choisis pour ce sous-espace est qu'ils soient orthogonaux.

2. Si cette valeur propre est dégénérée les choses sont un peu plus compliqués que cela (voir section C.3).

Exemple C.3 : Dégénérescence

Considérons l'observable à nouveau $\hat{Z}\hat{Z}$. On a déjà établi (sans le mentionner) à l'exemple 4.B que les états de base

$$|00\rangle\,, \quad |01\rangle\,, \quad |10\rangle \quad \text{et} \quad |11\rangle$$

sont des états propres de $\hat{Z}\hat{Z}$ avec les valeurs propres respectives

$$+1, \quad -1, \quad -1 \quad \text{et} \quad +1.$$

La valeur propre $+1$ est dégénérée, car elle est associée à deux états propres, soient $|00\rangle$ et $|11\rangle$. La valeur propre -1 est également dégénérée pour les mêmes raisons. Ces deux valeurs propres sont associées aux sous-espaces

$$\{|00\rangle\,, |11\rangle\} \quad \text{et} \quad \{|01\rangle\,, |10\rangle\}.$$

Ainsi tout état qui se retrouve dans un de ces sous-espaces est également un état propre de $\hat{Z}\hat{Z}$ avec la valeur propre associée. Par exemple,

$$|\Psi^+\rangle = \alpha\,|01\rangle + \beta\,|10\rangle$$

est un état propre de $\hat{Z}\hat{Z}$ avec la valeur propre $+1$. En effet,

$$\begin{aligned}\hat{Z}\hat{Z}\,|\Psi^+\rangle &= \alpha\,\hat{Z}\hat{Z}\,|01\rangle + \beta\,\hat{Z}\hat{Z}\,|10\rangle \\ &= \alpha\,(-1)\,|01\rangle + \beta\,(-1)\,|10\rangle = (-1)\,|\Psi^+\rangle\,.\end{aligned}$$

On pourrait donc choisir les états

$$|\Psi^+\rangle = \alpha\,|01\rangle + \beta\,|10\rangle \quad \text{et} \quad |\Psi^-\rangle = \beta^*\,|01\rangle - \alpha^*\,|10\rangle$$

comme base du sous-espace associé à la valeur propre (-1). En effet, ceux-ci sont bien orthogonaux

$$\langle\Psi^+|\Psi^-\rangle = (\beta\,\langle 01| - \alpha\,\langle 10|)(\alpha\,|01\rangle + \beta\,|10\rangle) = \beta\alpha - \alpha\beta = 0$$

Remarque

La dégénérescence d'états quantiques peut amener son lot de complexités dans la description des phénomènes quantiques.

C.4 Forme spectrale

Tout opérateur qui répond à une équation aux valeurs propres telle que l'équation 4.10 peut être exprimée sous sa forme spectrale

$$\hat{A} = \sum_j \lambda_j\,|\phi_j\rangle\langle\phi_j| \tag{4.12}$$

qui apparait comme une combinaison linéaire des projecteurs des états propres de $\hat{A}$ pondérés par leurs valeurs propres. On peut rapidement voir que cette formulation permet de respecter trivialement l'équation aux valeurs propres. En effet,

$$\hat{A}\,|\phi_j\rangle = \sum_k \lambda_k\,|\phi_k\rangle\langle\phi_k|\phi_j\rangle = \sum_k \lambda_k\,|\phi_k\rangle\,\delta_{kj} = \lambda_j\,|\phi_j\rangle$$

Exemple C.4 : Forme spectrale de $\hat{Z}$

La forme spectrale de l'opérateur $\hat{Z}$ est simplement donnée par

$$\hat{Z} = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$$

Elle fait intervenir deux types d'ingrédients principaux. D'abord, les $|\cdot\rangle\langle\cdot|$ sont les projecteurs. La décomposition spectrale d'un opérateur est une combinaison linéaire des projecteurs pour les états propres de l'opérateur. Les coefficients devant chaque projecteur sont les valeurs propres associées à chaque état propre. Cette construction assure que l'équation aux valeurs propres de l'opérateur soit respectée. En effet, dans ce cas-ci on a

$$\hat{Z}\,|0\rangle = |0\rangle\langle 0|0\rangle - |1\rangle\langle 1|0\rangle = |0\rangle \quad \text{et} \quad \hat{Z}\,|1\rangle = |0\rangle\langle 0|1\rangle - |1\rangle\langle 1|1\rangle = -\,|1\rangle\,.$$

Remarque

L'écriture sous forme spectrale 4.12 n'est pas exclusive aux observables, mais s'applique également à tout opérateur qui répond à une équation aux valeurs propres de la forme 4.10.

Une forme spectrale particulièrement utile est celle de l'opérateur identité. Toutes les valeurs propres de l'opérateur identité sont égales à 1. Sa forme spectrale est donc simplement

$$\hat{I} = \sum_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\,. \tag{4.13}$$

Comme toutes les valeurs propres de cet opérateur sont égales à 1, elles sont donc également toutes dégénérées. Cela implique qu'on peut définir une forme spectrale pour l'opérateur identité pour n'importe quelle base pourvu que celle-ci soit orthonormée. On fait souvent référence à cette équation comme étant la *relation de fermeture* et elle est régulièrement utilisée dans diverses démonstrations.

Exemple C.5 : Relation de fermeture à deux qubits

Pour un système à deux qubits, on peut écrire une relation de fermeture dans la base computationnelle comme étant

$$\hat{I} = |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 10| + |11\rangle\langle 11|\,.$$

ou en utilisant les états définis à l'exemple C.3 qui sont une généralisation des états de Bell

$$\hat{I} = |\Phi^+\rangle\langle\Phi^+| + |\Phi^-\rangle\langle\Phi^-| + |\Psi^+\rangle\langle\Psi^+| + |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|\,.$$

Ces deux expressions sont égales et totalement équivalentes.

C.5 Opérateur Hermitien

Lorsqu'on spécifie une quantité physique d'un système, on lui attribue généralement une valeur (et des unités, mais notre discussion n'ira pas dans cette direction). Cette valeur est donnée sous la forme d'un nombre réel. On exige donc que toutes les valeurs propres d'une observable soient des nombres réels. On exige aussi que les états propres d'une observable soient orthogonaux. Ces deux conditions réunies impliquent qu'une observable est un opérateur Hermitien. La caractéristique qui définit un opérateur Hermitien est qu'il est égal à son conjugué Hermitien

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}.$$

On peut facilement démontrer qu'un opérateur Hermitien remplit ces deux critères en utilisant la forme spectrale de l'observable 4.12, le fait que ses valeurs propres soient réelles ainsi que les propriétés des projecteurs.

C.6 Probabilités de mesure

La mesure d'une observable $\hat{A}$ sur un état $|\psi\rangle$ retourne donc un résultat parmi l'ensemble des valeurs propres $\{\lambda_j\}$ associées à cette observable. La probabilité d'obtenir chacun de ces résultats dépend de l'état du système avant la mesure. En effet, la probabilité d'obtenir que le système soit mesuré dans l'état $|\phi_j\rangle$ est donnée par la règle de Born

$$p_j = |\langle\phi_j|\psi\rangle|^2.$$

Dans le cas sans dégénérescence, cette probabilité donne directement la probabilité d'obtenir la valeur λ_j lors de cette mesure.

En revanche, s'il existe plus d'un état propre associé à une valeur propre $\lambda^{(g)}$, la probabilité d'obtenir cette valeur lors d'une mesure est égale à la somme des probabilités d'obtenir chacun des états propres associés à cette même valeur propre

$$p^{(g)} = \sum_{j\in g} |\langle\phi_j|\psi\rangle|^2.$$

C.7 Valeur moyenne

Comme les résultats de mesure d'un système quantique sont aléatoires, nos efforts pour acquérir de l'information sur celui-ci doivent donc reposer sur la répétition. En particulier, on peut s'intéresser à la valeur moyenne d'une observable. Comme chaque résultat de mesure λ_j a une probabilité p_j de survenir, la moyenne des valeurs propres λ_j pondérées par leurs probabilités de survenir est donc

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi = \sum_j p_j\lambda_j. \tag{4.14}$$

Dans cette section, nous allons montrer que cette même valeur moyenne peut en fait être exprimée comme le produit suivant

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

que nous avons déjà rencontré aux sections 4.A et 4.B.

Valeur moyenne d'un état propre

Tentons d'abord d'exprimer la valeur moyenne pour un état propre de l'observable en question. À l'aide de l'expression pour un élément de matrice d'une observable dans sa base d'états propres 4.11, on peut facilement montrer que la valeur moyenne d'une observable $\hat{A}$ sur un état propre $|\phi_j\rangle$ donne directement la valeur propre associée à cet état propre. En effet,

$$\langle\hat{A}\rangle_{\phi_j} = \langle\phi_j|\hat{A}|\phi_j\rangle = \lambda_j\delta_{jj} = \lambda_j \tag{4.15}$$

car l'état propre est normalisé. La probabilité d'obtenir la valeur propre λ_j lorsque le système est dans l'état $|\phi_j\rangle$ étant de 100% (et 0% pour tous les autres états), on constate que ce résultat est cohérent avec l'équation 4.14.

Valeur moyenne d'un état quelconque

Nous avons vu à l'équation 3.4 du chapitre 3 qu'un état quantique quelconque $|\psi\rangle$ peut toujours être écrit comme une combinaison linéaire de tous les états de base parce que ceux-ci constituent (justement) une base. Comme les états propres d'une observable forment une base (voir équation 4.9) on peut écrire un état quantique quelconque comme une combinaison linéaire de ceux-ci. On peut faire usage de la

relation de fermeture afin d'obtenir cette combinaison linéaire. En effet, en appliquant la forme spectrale de l'opérateur identité à un état quantique quelconque, on obtient

$$|\psi\rangle = \hat{I}\,|\psi\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\psi\rangle = \sum_j \alpha_j\,|\phi_j\rangle$$

où les coefficients sont donnés par

$$\alpha_j = \langle\phi_j|\psi\rangle\,.$$

On peut donc toujours écrire un état quantique comme une combinaison linéaire des états propres d'une observable donnée.

Cette décomposition sur la base des états propres de l'observable nous permet de calculer la valeur moyenne d'une observable pour un état quantique quelconque. D'abord, on écrit cette valeur moyenne grâce au produit

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \left(\sum_k \alpha_k^*\,\langle\phi_k|\right)\hat{A}\left(\sum_j \alpha_j\,|\phi_j\rangle\right)$$

où on a pris soin d'utiliser des indices différents pour les deux sommes et de prendre le complexe conjugué des coefficients du *bra*. En distribuant les produits, on fait apparaitre les éléments de matrice de l'observable dans sa base propre

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi = \sum_{k,j} \alpha_k^*\alpha_j\langle\phi_k|\hat{A}|\phi_j\rangle\,.$$

En utilisant l'équation 4.11, on obtient l'expression

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi = \sum_j |\alpha_j|^2\lambda_j$$

qui est exactement l'expression de la valeur moyenne de l'équation 4.14 car $p_j = |\alpha_j|^2 = |\langle\phi_j|\psi\rangle|^2$ est la probabilité d'obtenir l'état $|\phi_j\rangle$ lorsqu'on mesure l'observable $\hat{A}$ sur l'état $|\psi\rangle$. L'appellation *valeur moyenne* prend alors tout son sens. En effet, celle-ci est une moyenne de toutes les valeurs propres de l'observable pondérée par les probabilités d'obtenir chacun des états propres.

D Précision de l'estimation

À chaque fois qu'on exécute et mesure un circuit quantique à n qubits on obtient un des 2^n états de base, et ce, de manière aléatoire. Chacun de ces états a une probabilité plus ou moins élevée de survenir. En réalité, chaque exécution du circuit correspond à un échantillon d'une variable aléatoire. En utilisant des concepts fondamentaux liés aux variables aléatoires (voir annexe D), nous allons établir comment évaluer la précision de l'estimation d'une valeur moyenne pour une observable quelconque.

À venir...

Annexe A

Démonstrations

Cette annexe contient des démonstrations qui trouvent des applications à plusieurs endroits dans les notes ou qui sont trop lourdes et auraient nui à la lecture.

1 Transformation Hadamard à plusieurs qubits

La transformation Hadamard à plusieurs qubits est impliquée dans de nombreux algorithmes. En particulier, on s'intéresse ici à la transformation des états de base à n qubits.

1.1 Transformation du premier état de base

Comme tous les qubits du premier état de base sont dans l'état $|0\rangle$, l'application d'une porte Hadamard sur chacun d'eux va produire un état $|+\rangle$. On peut expliciter cela en écrivant.

$$\hat{H}^{\otimes n} |0\rangle^{\otimes n} = \bigotimes_{q=0}^{n-1} \hat{H} |0\rangle = \bigotimes_{q=0}^{n-1} |+\rangle = |+\rangle^{\otimes n}.$$

On va montrer ici, qu'un tel état est en fait une superposition uniforme de tous les états de base à n qubits. D'abord, on écrit chacun des états $|+\rangle$ en fonction des états de base à un qubit

$$|+\rangle^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \bigotimes_{q=0}^{n-1} (|0\rangle + |1\rangle).$$

On explicite ensuite le produit tensoriel pour obtenir n paires de termes

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \bigotimes_{q=0}^{n-1} (|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \underbrace{(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \ldots \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle)}_{n \text{ fois}}.$$

On peut facilement se convaincre que le produit de ces n paires de termes va produire une somme 2^n termes

$$\underbrace{(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \ldots \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle)}_{n \text{ fois}} = \underbrace{|0\ldots00\rangle + |0\ldots01\rangle + |0\ldots10\rangle + \ldots + |1\ldots11\rangle}_{2^n \text{ termes}} \tag{A.1}$$

qui ne sont rien d'autre que tous les états de base à n qubits. Ainsi, on peut résumer que le produit tensoriel de n qubits dans l'état $|+\rangle$ retourne une superposition de tous les états de base

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \bigotimes_{q=0}^{n-1} (|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \tag{A.2}$$

On conclut donc que la transformation Hadamard à n qubits appliqués au premier état de base produit une superposition uniforme de tous les états de base à n qubits

$$\hat{H}^{\otimes n} |0\rangle^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \,. \tag{A.3}$$

1.2 Relations utiles

L'état obtenu à la section précédente peut être exprimé de plusieurs manières différentes. En les décrivant et en sachant qu'elles sont toutes équivalentes, on pourra établir des relations qui nous seront fort utiles pour la suite. La première expression est déjà donnée à l'équation A.3

$$|+\rangle^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \,. \tag{A.4}$$

La seconde s'obtient en écrivant chacun des états $|+\rangle$ comme une somme sur les deux états de base du qubit q on peut écrire

$$|+\rangle^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \bigotimes_{q=0}^{n-1} \sum_{x_q=0}^{1} |x_q\rangle \,. \tag{A.5}$$

Pour la troisième, on constate que le côté droit de l'équation A.1 peut également être exprimé comme le résultat de n sommes sur les deux états de base de chacun des qubits

$$\underbrace{\sum_{x_{n-1}=0}^{1} \dots \sum_{x_0=0}^{1}}_{n \text{ sommes}} |x_{n-1} \cdots x_0\rangle = \underbrace{|0\dots00\rangle + |0\dots01\rangle + |0\dots10\rangle + \dots + |1\dots11\rangle}_{2^n \text{ termes}} .$$

En écrivant l'état $|x_{n-1} \cdots x_0\rangle$ comme un produit tensoriel, on obtient la dernière expression

$$|+\rangle^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \underbrace{\sum_{x_{n-1}=0}^{1} \dots \sum_{x_0=0}^{1}}_{n \text{ sommes}} \bigotimes_{q=0}^{n-1} |x_q\rangle \,. \tag{A.6}$$

En mettant en relation les équations A.4 et A.6, on déduit qu'une somme sur les 2^n état de base à n qubits est équivalente à n sommes sur les deux états de base de chacun des qubits

$$\sum_{x=0}^{2^n-1} (\dots) = \underbrace{\sum_{x_{n-1}=0}^{1} \dots \sum_{x_0=0}^{1}}_{n \text{ sommes}} (\dots). \tag{A.7}$$

En mettant en relation les équations A.5 et A.6, constate qu'on peut sortir une somme sur les deux états de base à un qubit d'un produit tensoriel en la remplaçant par les n sommes sur chacun des n qubits

$$\bigotimes_{q=0}^{n-1} \sum_{x_q=0}^{1} (\dots) = \underbrace{\sum_{x_{n-1}=0}^{1} \dots \sum_{x_0=0}^{1}}_{n \text{ sommes}} \bigotimes_{q=0}^{n-1} (\dots). \tag{A.8}$$

1.3 Transformation générale d'un état de base

On peut maintenant se pencher sur la transformation Hadamard des autres états de base à n qubits. D'abord, un état de base est un état produit

$$|x\rangle = |x_{n-1} \cdots x_0\rangle = \bigotimes_{q=0}^{n-1} |x_q\rangle$$

où chacun des bits x_q peut être dans les états $|0\rangle$ ou $|1\rangle$. L'application d'une porte Hadamard sur un qubit dans chacun de ces états va respectivement produire les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$. On peut résumer cela avec l'équation suivante

$$\hat{H}\,|x_q\rangle = \frac{|0\rangle + (-1)^{x_q}\,|1\rangle}{\sqrt{2}}$$

où on obtient bien $|+\rangle$ si $x_q = 0$ et $|-\rangle$ si $x_q = 1$. La transformation Hadamard d'un état de base peut donc s'exprimer comme

$$\hat{H}^{\otimes n}\,|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \bigotimes_{q=0}^{n-1} (|0\rangle + (-1)^{x_q}\,|1\rangle). \tag{A.9}$$

Comme à la section 1.1, le produit tensoriel de n paires de termes va produire une superposition des 2^n états de base. Cependant, dans ce cas-ci, chacun des différents états de base sera affecté d'une phase. Pour identifier la phase de chaque état de base, notons qu'on peut écrire l'état de chaque qubit après la transformation Hadamard comme étant une somme sur ses deux états de base

$$\frac{|0\rangle + (-1)^{x_q}\,|1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{z_q=0}^{1} (-1)^{x_q z_q}\,|z_q\rangle\,.$$

Le facteur de phase devient $(-1)^{x_q z_q}$ pour s'assurer que la phase -1 est appliquée uniquement quand $|z_q\rangle = |1\rangle$. L'expression A.9 devient alors

$$\hat{H}^{\otimes n}\,|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \bigotimes_{q=0}^{n-1} \sum_{z_q=0}^{1} (-1)^{x_q z_q}\,|z_q\rangle\,.$$

Insistons ici sur le fait que les bits x_q décrivent l'état initial, alors que les bits z_q servent à décrire l'état transformé.

On fait ensuite usage de la relation A.8 pour sortir la somme sur z_q du produit tensoriel

$$\hat{H}^{\otimes n}\,|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \underbrace{\sum_{z_{n-1}=0}^{1} \cdots \sum_{z_0=0}^{1}}_{n \text{ sommes}} \bigotimes_{q=0}^{n-1} (-1)^{x_q z_q}\,|z_q\rangle\,. \tag{A.10}$$

On voit que l'état $\hat{H}^{\otimes n}\,|x\rangle$ est une superposition d'états qui ne sont rien d'autre que les états de base accompagnés d'un facteur de phase. En effet,

$$\bigotimes_{q=0}^{n-1} (-1)^{x_q z_q}\,|z_q\rangle = (-1)^{x_0 z_0 + \ldots + x_{n-1} z_{n-1}} \bigotimes_{q=0}^{n-1} |z_q\rangle$$

où on a sorti les n facteurs de phase du produit tensoriel pour les combiner en un seul. Pour simplifier l'expression de l'état $\hat{H}^{\otimes n}|x\rangle$ notons les états de base qui décrivent l'état transformé à l'aide d'entiers z tel que

$$|z\rangle = \bigotimes_{q=0}^{n-1} |z_q\rangle \,.$$

On peut alors écrire l'état

$$\bigotimes_{q=0}^{n-1} (-1)^{x_q z_q} |z_q\rangle = (-1)^{x\cdot z} |z\rangle$$

où

$$x \cdot z = \sum_{q=0}^{n_1} x_q z_q = x_0 z_0 + \ldots + x_{n-1} z_{n-1} \tag{A.11}$$

est un produit scalaire entre les bits qui composent l'entier x et ceux qui composent l'entier z. En réécrivant l'équation A.10 à l'aide de cette expression et en utilisant l'équivalence A.7 pour remplacer les sommes sur les z_q par une somme sur z, on obtient

$$\hat{H}^{\otimes n}|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{z=0}^{2^n-1} (-1)^{x\cdot z} |z\rangle \,. \tag{A.12}$$

Ainsi, la transformation Hadamard d'un état de base retourne une superposition uniforme de tous les états de base où chacun d'eux est affecté par une phase qui dépend du produit scalaire entre les bits de l'entier z et les bits de l'entier x de l'état de base initial.

Annexe B

Nombres complexes

Les nombres complexes sont un outil extrêmement utile dans la théorie de la mécanique quantique pour représenter les phases nécessaires pour décrire un état quantique. L'objectif de cette section est d'introduire de manière originale les nombres complexes.

1 Représentation géométrique des nombres réels

Nous utiliserons une représentation géométrique des nombres complexes pour les introduire. Considérons d'abord l'équation suivante

$$x^2 = 4. \tag{B.1}$$

Pour solutionner cette équation, on doit trouver une valeur de x qui, lorsque mise au carré, donne 4. La réponse est triviale : $x = 2$.

Malgré cela, réécrivons la même équation de la manière suivante,

$$1 \times x \times x = 4.$$

et interprétons $\times x$ comme une transformation qui permet de nous déplacer sur l'axe des nombres réels. Par exemple, l'application de $\times 2$ agit comme une transformation qui double la coordonnée sur l'axe des réels.

Dans ce contexte, on cherche donc une transformation qui, lorsqu'appliquée deux fois, à partir de 1, nous amène à 4. La figure B.1 illustre comment on peut utiliser la transformation $\times x$ pour se déplacer sur l'axe des réels, à partir de la position 1, et comment elle peut être appliquée deux fois pour nous amener à la position 4. La solution est encore une fois évidente $x = 2$.

Cependant, on constate qu'il y a un autre chemin pour passer de 1 à 4 en appliquant deux fois la même transformation : on peut doubler la coordonnée tout en effectuant une rotation de π radians (ou 180°). La rotation de π peut être représentée par le nombre -1 ($x = 2 \times -1$). La solution $x = -2$ est la seconde solution possible à l'équation B.1.

On peut donc représenter la multiplication par un nombre réel comme étant une transformation géométrique d'un vecteur où on peut changer sa longueur ainsi que sa direction par un angle π s'il est négatif.

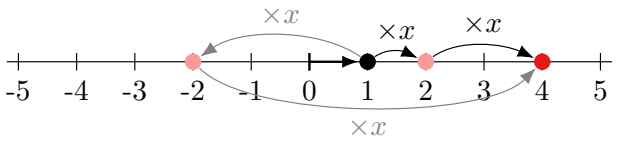


FIGURE B.1 – Représentations géométriques des solutions à l'équation $x^2 = 4$

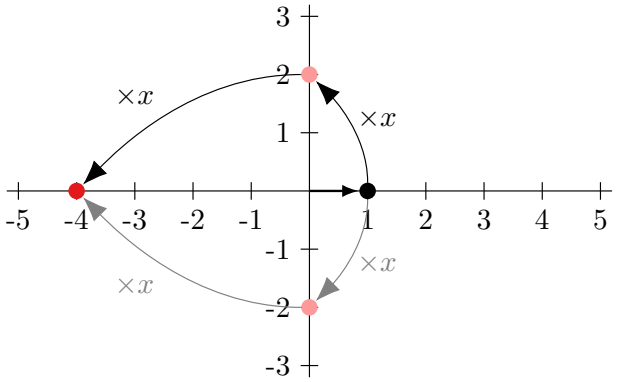


FIGURE B.2 – Représentation géométrique de la solution à l'équation $x^2 = -4$

2 Représentation géométrique des nombres complexes

Les nombres complexes sont une invention qui permet de trouver les solutions à l'équation suivante

$$x^2 = -4 \qquad\qquad 1 \times x \times x = -4. \tag{B.2}$$

Notre réflexe pour solutionner une équation quadratique est de prendre la racine carrée. Malheureusement, l'équation

$$x = \sqrt{-4}\,?$$

n'a pas vraiment de sens dans le contexte des nombres réels.

Avec notre approche géométrique, cela revient à chercher une transformation qui, lorsqu'appliquée deux fois, à partir du nombre 1, nous amènent au nombre -4. En utilisant uniquement une dimension comme à la figure précédente, cela est impossible. Pour y arriver, on doit « penser à l'extérieur de la boîte ». En effet, on doit sortir de l'axe des nombres réels (horizontal) et passer par l'axe imaginaire (vertical) comme cela est illustré à la figure B.2.

Une première solution consisterait donc à appliquer une transformation qui double la longueur d'un vecteur tout en effectuant une rotation de $\pi/2$ radians (90°) dans le sens antihoraire. Écrivons cette rotation d'un quart de tour comme la lettre i de sorte que la solution soit $x = 2 \times i$. Une seconde solution similaire consiste à tourner de $3\pi/2$ (270°) ou bien $-\pi/2$, c'est-à-dire dans l'autre sens. On donc peut représenter cette transformation comme $x = 2 \times i \times -1$.

Mais que vaut i ? Pour le savoir, remplaçons notre première solution dans l'équation B.2. On trouve alors

$$(2 \times i)^2 = -4 \qquad\qquad 4i^2 = -4 \qquad\qquad i^2 = -1.$$

Ce qui signifie que $i = \pm\sqrt{-1}$!

Remarque

La définition $i = \pm\sqrt{-1}$ est ambigüe. En effet, avec cette définition, il est possible d'arriver à certaines incohérences. C'est pourquoi il est préférable d'utiliser la définition $i^2 = -1$.

On peut ensuite se demander où se trouve le nombre i sur le plan de la figure B.2 ? On sait que i effectue une rotation de $\pi/2$ dans le sens antihoraire. En appliquant $\times i$ sur 1 on obtient $1 \times i = i$. La rotation de $\pi/2$ à partir de 1 nous amène une unité au-dessus de l'origine, directement sur l'axe vertical. Il est illustré par un point bleu à la figure B.3. On l'appelle l'axe des *imaginaires* et i est l'unité imaginaire.

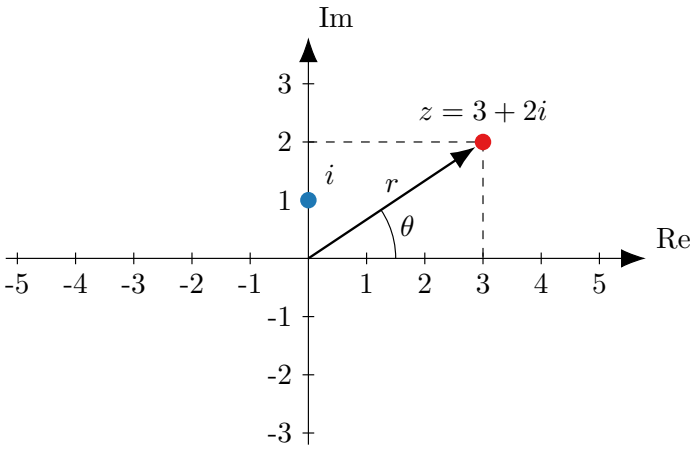


FIGURE B.3 – Représentation d'un nombre complexe dans un espace à 2 dimensions.

L'espace à deux dimensions qu'on vient de former en sortant de l'axe des réels et appelé le *plan complexe*. Il est typiquement représenté avec l'axe des réels à l'horizontale et l'axe des imaginaires à la verticale.

Exercice 2.1 : Rotations en i

La multiplication par un nombre complexe permet d'effectuer une rotation dans le plan complexe. Donnez l'angle de la rotation provoquée par la multiplication des nombres complexes suivants. Supposez une rotation dans le sens contraire des aiguilles d'une montre.

a) $-i$ b) i^3 c) $\sqrt{i}$

3 Représentation algébrique des nombres complexes

On peut alors construire un nombre *complexe* en combinant une partie réelle (Re) et une partie imaginaire (Im) comme on le ferait pour un vecteur à deux dimensions. La figure B.3 illustre le nombre complexe z ayant une partie réelle égale à 3 et une partie imaginaire égale à 2. On peut écrire ce nombre comme

$$z = 3 + 2i.$$

3.1 Forme cartésienne

De manière générale, un nombre complexe s'écrit comme une somme

$$z = a + ib$$

avec a et b des nombres réels respectivement appelées partie réelle et partie imaginaire et également notées $\mathrm{Re}\{z\}$ et $\mathrm{Im}\{z\}$. Cette forme est appelée la forme algébrique ou forme cartésienne.

3.2 Forme polaire

Toujours sur la figure B.3, nous avons également représenté le nombre z dans sa forme polaire. Sous cette forme, un nombre complexe est d'abord déterminé par un *module* r (une longueur, réelle et positive) et ensuite par un *argument* θ (un angle en radian également appelé phase). Un peu de trigonométrie nous permet d'identifier les composantes réelle et imaginaire de z comme étant

$$a = r\cos\theta \quad \text{et} \quad b = r\sin\theta,$$

ce qui nous permet d'écrire un nombre complexe général grâce à ses coordonnées polaires

$$z(r,\theta) = r\cos\theta + ir\sin\theta = r(\cos\theta + i\sin\theta).$$

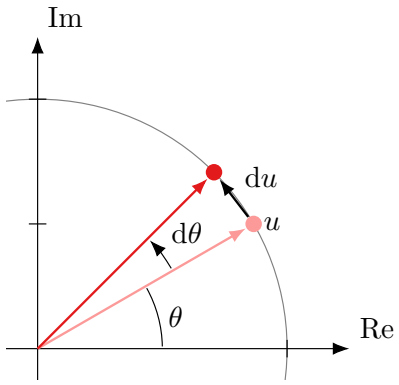


FIGURE B.4 – Déplacement d'un nombre complexe u provoqué par une variation d'argument.

4 Relation d'Euler et forme exponentielle

Il existe une autre forme pour exprimer les nombres complexes, basée sur la forme polaire, qui nous sera particulièrement utile : la forme exponentielle. Pour pouvoir l'utiliser, on doit d'abord établir la relation d'Euler.

Pour ce faire, considérons un nombre complexe de module unité ($r = 1$) exprimé sous forme polaire

$$u = \cos\theta + i\sin\theta$$

et voyons ce qui arrive lorsqu'on fait varier son argument θ. Un rapide coup d'œil à la figure B.4 nous permet de constater que le nombre complexe u effectue des rotations sur un cercle de rayon 1 autour de l'origine lorsque θ augmente.

La relation entre le déplacement $\mathrm{d}u$ provoqué par un changement d'argument $\mathrm{d}\theta$ peut être obtenue en dérivant y par rapport à θ. On obtient assez facilement

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\theta} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\cos\theta + i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\sin\theta \\ &= -\sin\theta + i\cos\theta \\ &= i(i\sin\theta + \cos\theta) = iu. \end{aligned} \tag{B.3}$$

L'égalité B.3 cache une dernière information cruciale : la dérivée de u par rapport à θ est égale à u avec un facteur multiplicatif i. Cela nous permet d'identifier que la rotation d'un angle θ peut être exprimée grâce à la fonction exponentielle. En effet, on sait que la fonction exponentielle $f(x) = be^{ax}$ se dérive de la manière suivante

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(be^{ax}) = abe^{ax} = af(x). \tag{B.4}$$

Les équations B.3 et B.4 sont parfaitement équivalentes, seuls les noms de variables et fonctions ont été changés. Ainsi, on déduit que l'équation B.3 permet d'écrire

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\theta} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(e^{i\theta}\right) = ie^{i\theta} = iu.$$

et on voit que $e^{i\theta}$ se comporte comme un nombre complexe de module unité u. Cela nous permet donc d'établir la relation d'Euler

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta. \tag{B.5}$$

On peut donc écrire les nombres complexes en général (de module différent de 1) sous une forme polaire plutôt compacte en utilisant la fonction exponentielle

$$z = z(r, \theta) = r\cos\theta + ir\sin\theta = re^{i\theta}.$$

Exercice 4.1 : Racine cubique

En utilisant le même genre d'arguments introduits pour la représentation géométrique des nombres complexes qui nous a permis de définir $\sqrt{-1}$, illustrez les positions dans le plan complexe des 3 solutions possibles pour chacune des racines cubiques suivantes :

a) $\sqrt[3]{-1}$ b) $\sqrt[3]{1}$ c) $\sqrt[3]{-8}$

Exercice 4.2 : Racine cubique et formule d'Euler

Écrivez toutes les racines cubiques que vous avez illustrées à l'exercice 4.1 sous la forme exponentielle.
Rappel : l'angle dans la forme exponentielle doit être exprimée en radians, idéalement comme une fraction de *pi*.

5 Opérations sur des nombres complexes

On peut effectuer plusieurs opérations sur les nombres complexes. Pour décrire un peu plus en détail comment l'addition et la multiplication se comportent pour des nombres complexes et pour introduire le conjugué complexe nous allons considérer les deux nombres complexes suivants

$$z_1 = a_1 + ib_1 = r_1 e^{i\theta_1} \quad \text{et} \quad z_2 = a_2 + ib_2 = r_2 e^{i\theta_2}.$$

5.1 Addition

L'addition de deux nombres complexes sous forme cartésienne s'effectue en combinant les parties réelles ensemble et les parties imaginaires ensemble. Ainsi,

$$z_1 + z_2 = (a_1 + ib_1) + (a_2 + ib_2) = (a_1 + a_2) + i(b_1 + b_2).$$

5.2 Multiplication

La multiplication de deux nombres complexes exprimés sous leurs formes cartésiennes s'effectue de la manière suivante

$$\begin{aligned} z_1 z_2 = (a_1 + ib_1)(a_2 + ib_2) &= a_1 a_2 + i a_1 b_2 + i b_1 a_2 + i^2 b_1 b_2 \\ &= (a_1 a_2 - b_1 b_2) + i(a_1 b_2 + b_1 a_2). \end{aligned}$$

La multiplication sous la forme exponentielle est particulièrement simple. En effet, en utilisant les propriétés des exposants

$$z_1 z_2 = r_1 e^{i\theta_1} r_2 e^{i\theta_2} = r_1 r_2 e^{i(\theta_1 + \theta_2)}$$

on voit que cela produit un nombre complexe dont le module est le produit des modules et la phase est la somme des phases.

5.3 Complexe conjugué

Terminons cette section en introduisant le complexe conjugué d'un nombre complexe. Pour obtenir le complexe conjugué z^* d'un nombre complexe z, on doit simplement effectuer la transformation $i \to -i$. Par exemple,

$$z = a + ib \quad \text{et} \quad z^* = a - ib.$$

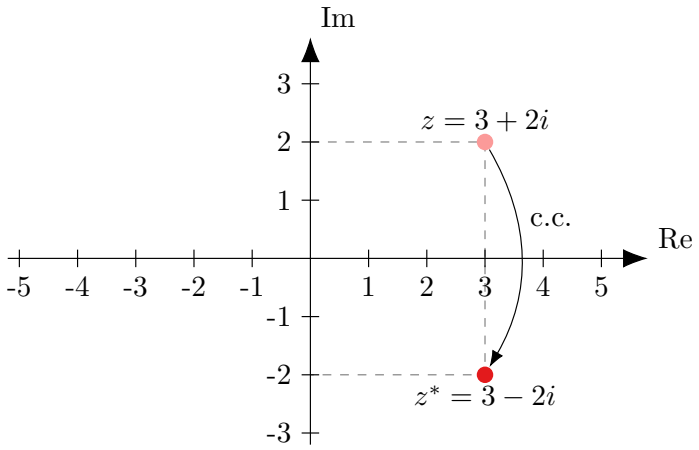


FIGURE B.5 – Complexe conjugué d'un nombre complexe

Cela correspond à une réflexion par rapport à l'axe des réels dans le plan complexe comme illustré à la figure B.5.

Le produit d'un nombre complexe avec son complexe conjugué est particulièrement intéressant. En effet,

$$\begin{aligned} zz^* &= (a+ib)(a-ib) = a^2 + iba - iab - i^2b^2 \\ &= a^2 + b^2 \end{aligned}$$

ce qui correspond à la relation de Pythagore qui est égale au carré du module. Pour cette raison, on écrit souvent cette opération comme

$$|z|^2 = zz^* = r^2.$$

et on désigne cette opération comme le *module au carré*.

Le complexe conjugué d'un nombre complexe sous forme exponentielle est simplement

$$z = re^{i\theta} \quad \rightarrow \quad z^* = re^{-i\theta}$$

où on utilisé le fait que r et θ sont des nombres réels. Ainsi le calcul du module carré sous cette forme est trivial

$$|z|^2 = zz^* = r^2 e^{i(\theta-\theta)} = r^2.$$

Exercice 5.1 : Module au carré

Calculez les modules au carré des nombres complexes suivants

a) $3 - 4i$
b) i
c) $1 + i$
d) $\cos\theta + i\sin\theta$?
e) $\frac{1}{\sqrt{3}} + i\sqrt{\frac{2}{3}}$
f) $\sqrt{\frac{2}{3}} - i\frac{1}{\sqrt{3}}$

Exercice 5.2 : Formes algébrique et exponentielle

Convertissez les nombres complexes suivants qui sont sous formes algébriques en leurs formes exponentielles et vice versa.

a) $\frac{1-i}{\sqrt{2}}$
b) $e^{i\pi/3}$
c) $2e^{-i\pi/2}$
d) $4e^{i\pi}$
e) $\cos(\theta) - i\sin(\theta)$
f) $\frac{\sqrt{3}}{2} - i\frac{1}{2}$

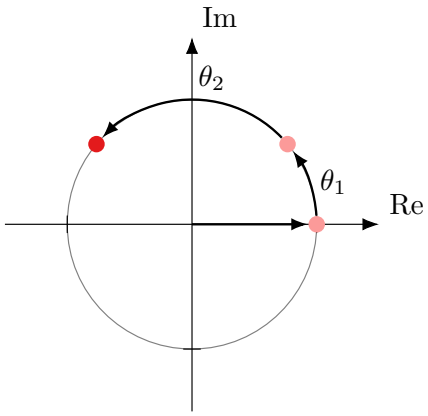


FIGURE B.6 – Addition des phases de deux nombres complexes

6 Les nombres complexes comme des transformations

Considérons maintenant la forme exponentielle comme une suite de transformations appliquées à 1

$$z(r, \theta) = 1 \times r \times e^{i\theta}.$$

Nous identifions la transformation $\times r$ comme l'étirement ($r > 1$) ou la contraction ($r < 1$) des distances par rapport à l'origine. La transformation $\times e^{i\theta}$ doit donc représenter une rotation dans le sens antihoraire d'un angle θ. Si l'on fait grandir la valeur de θ, le point z va tourner autour de l'origine sur un cercle de rayon r. La direction de son déplacement est toujours perpendiculaire au segment qui relie z à l'origine.

On peut confirmer que $\times e^{i\theta}$ doit représenter une rotation dans le sens antihoraire d'un angle θ en considérant l'application de 2 rotations successives pour des angles θ_1 et θ_2 ? La figure B.6 montre bien que cela produit une rotation d'un angle $\theta_1 + \theta_2$. La forme exponentielle des nombres complexes est cohérente avec cela. En effet, on obtient alors une rotation

$$1 \times e^{i\theta_1} \times e^{i\theta_2} = e^{i(\theta_1+\theta_2)}$$

pour un angle total de $\theta_1 + \theta_2$. La forme exponentielle est donc très utile et plutôt simple à utiliser !

Exercice 6.1 : Racine $n^{\text{ième}}$

Donnez une forme générale pour les racines $n^{\text{ième}}$ de 1

$$z^n = 1 \qquad\qquad z = \sqrt[n]{1} = \ ?$$

Indice : vous pouvez commencer par refaire l'exercice précédent pour les racines d'ordre 4.

Exercice 6.2 : Transformations pures

Quelle condition un nombre complexe z doit-il respecter pour produire une transformation dans le plan complexe qui soit

1. uniquement une rotation ;
2. uniquement une mise à l'échelle (étirement ou compression).

Annexe C

Notation indicielle

La notation indicielle n'est qu'une manière plus compacte d'écrire certaines équations qui pourraient autrement être plus longues à écrire. Prenons l'exemple d'un système de deux équations linéaires

$$\begin{aligned} 2x + 5y \qquad &= 4 \\ x - 4y + 7z &= 0. \end{aligned}$$

L'algèbre linéaire nous a appris qu'on peut écrire un tel système d'équations sous une forme matricielle

$$\begin{pmatrix} 2 & 5 & 0 \\ 1 & -4 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

En définissant la matrice et les vecteurs suivants

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 2 & 5 & 0 \\ 1 & -4 & 7 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \end{pmatrix}$$

nous arrivons à écrire tout cela de manière beaucoup plus courte

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}. \tag{C.1}$$

1 Matrices et vecteurs comme tenseurs

Afin de donner une adresse à chaque élément d'une matrice où d'un vecteur on identifie avec M_{ij} l'élément situé à la ligne i et à la colonne j dans la matrice $\mathbf{M}$. On peut faire cela pour des matrices et des vecteurs [1]

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}.$$

Ainsi, on a par exemple $M_{12} = 5$ et $b_1 = 4$.

On peut accéder à un *élément* d'une matrice en spécifiant les numéros de ligne et de colonne de celui-ci. Une notation fréquemment utilisée est la suivante,

$$(\mathbf{M})_{12} = M_{12} = 5.$$

1. On choisi ici de commencer la numérotation à 1, ce qui n'est pas cohérent avec les sections principales de ces notes.

Selon cette notation on a donc de manière générale

$$(\mathbf{M})_{ij} = M_{ij}.$$

La matrice $\mathbf{M}$ (comme toutes les matrices) est équivalente à un *tenseur* d'ordre 2, car il est nécessaire de spécifier 2 indices pour aller chercher chacun de ses éléments. Les vecteurs sont équivalents à des tenseurs d'ordre 1. Les scalaires sont des tenseur d'ordre 0 car ils ne contiennent qu'une seule valeur.

Le terme tenseur est donc un terme très général pour désigner un objet qui prend la forme d'un tableau de quantités ou de variables.

En général, les indices d'un tenseur peuvent prendre autant de valeurs que le nombre de dimensions que comportent les espaces dans lesquels ils existent. Chaque valeur d'indice est associée à une direction de cet espace. Par exemple, les indices i et j pour M_{ij} peuvent chacun prendre les valeurs $i \in \{1, 2\}$ et $j \in \{1, 2, 3\}$ respectivement. Ainsi l'indice i existe dans un espace à deux dimensions et j dans un espace à trois dimensions.

2 Produit matricielle en notation indicielle

Explicitons le produit de l'équation C.1

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}x_1 + M_{12}x_2 + M_{13}x_3 \\ M_{21}x_1 + M_{22}x_2 + M_{23}x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}.$$

On voit que les composantes du vecteur $\mathbf{b}$ sont égaux à l'addition de trois termes. Il est possible de résumer cela grâce à une somme. Par exemple, la première composante de $\mathbf{b}$ s'écrit

$$b_1 = M_{11}x_1 + M_{12}x_2 + M_{13}x_3 = \sum_{j=1}^{3} M_{1j}x_j \tag{C.2}$$

ce qui est manifestement plus compact.

On pourrait faire la même chose pour l'autre composante de $\mathbf{b}$. On généralise ce résultat pour le $i^{\text{ième}}$ élément de $\mathbf{b}$. La notation indicielle nous permet d'écrire une forme générale pour les composantes du vecteur $\mathbf{b}$

$$b_i = \sum_{j=1}^{3} M_{ij}x_j. \tag{C.3}$$

Cette expression est totalement équivalente au produit présenté à l'équation C.1.

3 Tenseurs d'ordre supérieur à 2

Comme nous résolvons des problèmes mathématiques sur une feuille de papier qui est un espace à deux dimensions, il nous est impossible d'écrire explicitement et simplement des tenseurs d'ordre supérieur à deux ! Nous pouvons néanmoins faire référence à chaque élément en spécifiant les indices correspondants. On peut alors travailler avec des tenseurs d'ordre trois ou supérieur. Il est facile de généraliser l'écriture des tenseurs d'ordre supérieur : on ajoute des indices ! Les éléments d'un tenseur $\mathbf{T}$ d'ordre trois seraient donc

$$T_{ijk}.$$

On pourrait représenter le tenseur $\mathbf{T}$ si on avait accès à une représentation en trois dimensions. Comme une matrice $\mathbf{M}$ prend la forme d'un rectangle, un tenseur $\mathbf{T}$ d'ordre trois prendrait alors la forme d'un prisme rectangulaire.

4 Analogie avec la programmation

Les indices dans cette notation peuvent être comparés aux compteurs utilisés dans les boucles `for` d'un programme informatique. Cette analogie est limitée, mais peut aider à comprendre le rôle des indices lors d'un premier contact avec cette notation. Par exemple, la somme de l'équation C.3 se traduirait ainsi en Python.

```
b = [0, 0]
for i in range(2):
    for j in range(3):
        b[i] = b[i] + M[i,j] * x[j]
```

Ce code permet de calculer les valeurs des composantes de **b** à partir des tenseurs **M** et **x**.

5 Notation d'Einstein

Supposons le produit de trois matrices (**A**, **B** et **C**) qui résulte en une quatrième matrice (**D**).

$$\mathbf{D} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{C}$$

On peut écrire l'élément de matrice D_{ij} à l'aide de la notation indicielle. Procédons étape par étape.

$$D_{ij} = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{C})_{ij} = \sum_k A_{ik} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C})_{kj} = \sum_k A_{ik} \left(\sum_m B_{km} C_{mj} \right) = \sum_{k,m} A_{ik} B_{km} C_{mj} \tag{C.4}$$

Dans la dernière expression, on remarque qu'on peut reconnaître les indices sur lesquels on effectue une somme car ils apparaissent toujours 2 fois. Le fait qu'il y ait un indice *répété* implique généralement qu'il y a une *somme* associée à celui-ci. Pour rendre la notation encore plus compacte, on peut omettre les symboles de sommation. Cette pratique s'appelle la convention de sommation d'Einstein [2]. On reconnaitra qu'une sommation est implicite chaque fois qu'on identifiera 2 fois le même indice. En utilisant cette convention, les équations C.3 et C.4 deviennent,

$$b_i = M_{ij} x_j \tag{C.5}$$

et

$$D_{ij} = A_{ik} B_{km} C_{mj}. \tag{C.6}$$

Les indices répétés sur lesquels on effectue une somme implicite sont dits *muets*. Dans l'équation C.5, l'indice j est muet. Dans l'équation C.6, les indices k et m sont muets.

Exercice 5.1 : Ordre de tenseur

Déterminez l'ordre de chacun de ces tenseurs. Écrivez également leur forme explicite en supposant des espaces vectorielles à 3 dimensions.

a) $K_{ij} = 2$
b) $\epsilon_{ijk}\delta_{ij}$
c) $\epsilon_{ij2}\delta_{i1}$
d) δ_{ii}
e) $2\delta_{i3}$
f) $1 - \delta_{ij}$
g) M^4_{ij}
h) $\epsilon_{ijk}\epsilon_{ijk}$

2. La description faite ici est simplifiée. La version complète fait intervenir des indices en bas ou en haut faisant référence à l'aspect covariant ou contravariant des tenseurs impliqués en relativité restreinte. Nous n'accorderons pas d'importance à cela dans ce document.

6 Tenseurs importants

Certains tenseurs sont régulièrement utilisés. En utilisant toujours la même notation on évite d'avoir à les redéfinir à chaque utilisation.

6.1 Symbole de Kronecker

On le note δ_{ij}. C'est un tenseur d'ordre 2. Il peut être utilisé dans des espaces de toutes les dimensions, mais ses indicies i et j doivent vivre dans des espaces de dimensions identiques. En d'autres termes, δ_{ij} est carré. Il est défini comme suit :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j. \end{cases} \tag{C.7}$$

Son application est triviale, tout comme la multiplication avec une matrice identité. On n'a qu'à remplacer l'indice sommé par l'autre indice du Kronecker. Par exemple,

$$M_{ik}\delta_{kj} = M_{ij}.$$

On peut s'en convaincre en réintroduisant le symbole de sommation

$$\sum_{k=1}^{n} M_{ik}\delta_{kj} = M_{i1}\delta_{1j} + M_{i2}\delta_{2j} + \ldots + M_{in}\delta_{nj} = M_{ij}$$

et en effectuant cette somme. La somme comporte n termes. Tous les δ_{kj} sont nuls, sauf celui pour lequel $k = j$. Ce terme est donc $M_{ij} \times 1 = M_{ij}$.

6.2 Levi-Civita

On le note ϵ_{ijk}. C'est un tenseur[3] d'ordre 3 dont chacun des indices désigne une direction dans un espace à 3 dimensions. On le définit ainsi :

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{si } (i,j,k) \in \{(1,2,3),(2,3,1),(3,1,2)\} \text{ (ordres cycliques)} \\ -1 & \text{si } (i,j,k) \in \{(3,2,1),(2,1,3),(1,3,2)\} \text{ (ordres anti-cycliques)} \\ 0 & \text{si } i = j \text{ ou } j = k \text{ ou } k = i \end{cases} \tag{C.8}$$

Par définition, ce tenseur possède une propriété de cyclicité avec ses indices ; et est antisymétrique sous inversion de 2 indices[4]. Les six permutations sont liées de la manière suivante

$$\epsilon_{ijk} = \epsilon_{kij} = \epsilon_{jki} = -\epsilon_{jik} = -\epsilon_{ikj} = -\epsilon_{kji}.$$

Le tenseur de Levi-Civita permet, en particulier, de définir le produit vectoriel en notation indicielle.

$$\mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{b} \quad \rightarrow \quad c_i = \epsilon_{ijk} a_j b_k \tag{C.9}$$

3. Rigoureusement ϵ_{ijk} est un pseudo tenseur.
4. Les indices sont en couleur pour aider la lecture.

Exemple 6.1 : Superposition uniforme à trois qubits

Calculons la première composante de $\mathbf{c}$ à titre d'exemple. La double somme comporte 9 termes au total

$$\begin{aligned} c_1 &= \sum_{jk} \epsilon_{1jk} a_j b_k \\ &= \epsilon_{111}a_1b_1 + \epsilon_{112}a_1b_2 + \epsilon_{113}a_1b_3 + \epsilon_{121}a_2b_1 + \epsilon_{122}a_2b_2 + \underbrace{\epsilon_{123}}_{=1} a_2b_3 + \epsilon_{131}a_3b_1 + \underbrace{\epsilon_{132}}_{=-1} a_3b_2 + \epsilon_{133}a_3b_3 \\ &= a_2b_3 - a_3b_2 \end{aligned}$$

dont seulement 2 ne s'annulent pas. Le même calcul pour chacune des composantes de $\mathbf{c}$ nous donne

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_2b_3 - a_3b_2 \\ a_3b_1 - a_1b_3 \\ a_1b_2 - a_2b_1 \end{pmatrix}.$$

Exercice 6.1 : Levi-Civita

a) Écrivez le produit triple sous forme indicielle. En utilisant les propriétés de ϵ_{ijk} démontrez l'identité suivante

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} \times \mathbf{a} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b}.$$

b) En utilisant la propriété de cyclicité de ϵ_{ijk}, démontrez l'identité suivante

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl},$$

ce qui vous permettra de démontrer cette dernière identité

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} \times \mathbf{c} = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}).$$

7 Quelques astuces et mises en garde

7.1 Cohérence dans les indices

L'opération qu'on effectue le plus souvent sur un tenseur est une somme selon un indice. Par exemple, une multiplication d'un tenseur d'ordre trois ($\mathbf{T}$) avec un tenseur d'ordre un ($\mathbf{r}$) sur le deuxième indice du tenseur T résulte en un tenseur d'ordre deux

$$S_{ik} = T_{ijk}r_j.$$

On verra toujours à vérifier que les indices, de part et d'autre, d'une équation sont cohérents. C'est-à-dire que tous les indices d'un côté se retrouvent également de l'autre côté, à l'exception des indices muets (sur lesquels une somme est effectuée ; j dans l'exemple précédent). Cette condition équivaut à dire qu'un vecteur doit toujours être égal à un vecteur avec le même nombre de composantes, une matrice égale à une matrice de même taille, un tenseur d'ordre n à un tenseur d'ordre n,...

Remarque

Dans certaines situations particulières, il arrive qu'un indice se retrouve d'un seul côté d'une équation. Un tel indice est dit *libre*. L'équation est généralement posée ainsi dans un but particulier. Cela veut généralement dire que l'équation est vérifiée, peu importe la valeur de cet indice. Par exemple, $r_i = 2$ définit un vecteur $\mathbf{r}$ dont toutes les composantes sont égales à 2.

7.2 Commutation des éléments de tenseurs

Les éléments des tenseurs sont généralement des scalaires. L'élément $M_{12} = 5$ est un scalaire. Les scalaires sont des objets qui commutent. On peut donc effectuer des opérations de commutation en notation

indicielle. Prenons l'exemple d'un produit entre 2 matrices qu'on écrit sous forme indicielle

$$\mathbf{S} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{Q} \quad \rightarrow \quad S_{ij} = M_{ik} Q_{kj}.$$

On peut changer l'ordre des éléments de matrice sans problème.

$$S_{ij} = M_{ik} Q_{kj} = Q_{kj} M_{ik}$$

Cela ne signifie pas que $\mathbf{M}$ et $\mathbf{Q}$ commutent ! La position de l'indice k s'assure qu'on effectuera le produit matriciel correctement. L'ordre des indices est donc important. Pour s'en convaincre considérons à nouveau l'expression explicite de produit C.5

$$b_i = M_{ij} x_j = M_{i1} x_1 + M_{i2} x_2 + M_{i3} x_3 = x_1 M_{i1} + x_2 M_{i2} + x_3 M_{i3} = x_j M_{ij}.$$

7.3 Matrice transposée

Lorsqu'on transpose une matrice, on échange ses lignes pour ses colonnes. En notation indicielle, cela revient donc a échanger les indices de ligne avec les indices de colonnes. Ainsi, on peut écrire

$$(\mathbf{M})_{ij} = (\mathbf{M}^\intercal)_{ji}.$$

Si on identifie les éléments de la matrice $\mathbf{M}^\intercal$ comme étant $M^\intercal_{ij}$ on peut alors également écrire

$$M_{ij} = M^\intercal_{ji}.$$

Cela est particulièrement utile lorsqu'on manipule des matrices unitaires. La matrice inverse d'une matrice unitaire étant donnée par sa conjuguée hermitienne (transposée, conjuguée complexe)

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^\dagger = (\mathbf{U}^*)^\intercal$$

on peut obtenir les élément de cette matrice simplement en écrivant

$$(\mathbf{U}^{-1})_{ij} = ((\mathbf{U}^*)^\intercal)_{ij} = (\mathbf{U}^*)_{ji} = U^*_{ji}.$$

En résumé,

$$U^{-1}_{ij} = U^*_{ji}$$

signifie que l'élement ij de la matrice inverse de $\mathbf{U}$ est égal au complexe conjugué de l'élément ji.

7.4 Choix des indices

Il est crucial de garder en tête le rôle de chacun des indices. On doit éviter d'utiliser deux fois le même indice pour désigner des sommes différentes. En effet, écrite comme ceci

$$D_{ij} = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{C})_{ij} \neq \sum_k \sum_k A_{ik} B_{kk} C_{kj}$$

l'équation C.6 n'a plus le même sens. Un peu comme en programmation, il ne faut pas utiliser deux fois le même nom pour deux variables différentes. Les lettres qu'on utilise n'ont pas d'importance, mais elles doivent être désignées correctement. Par exemple, les équations suivantes sont équivalentes :

$$S_{ij} = M_{ik} Q_{kj} \quad \text{et} \quad S_{\alpha\beta} = M_{\alpha\gamma} Q_{\gamma\beta}.$$

Les indices muets peuvent être renommés à volonté pour accommoder certains calculs, en respectant toutefois la signification de chacun des indices. Par exemple, on peut changer la lettre de l'indice de sommation du deuxième terme de l'équation suivante

$$A_{ij} = B_{ik} C_{kj} + D_{il} C_{lj} = B_{ik} C_{kj} + D_{ik} C_{kj} = (B_{ik} + D_{ik}) C_{kj}$$

ce qui nous a permis d'effectuer une mise en évidence.

7.5 Piège : redondance accidentelle d'indices muets

Considérons maintenant les deux produits suivants.

$$A_{ij} = B_{ik}C_{kj} \qquad\qquad D_{ij} = E_{ik}F_{kj}$$

On désire faire le produit matriciel de $\mathbf{A}$ avec $\mathbf{D}$, ce qui s'écrit ainsi sous forme indicielle.

$$\mathbf{G} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{D} \quad \rightarrow \quad G_{ij} = A_{im}D_{mj}$$

Les indices de cette dernière équation ne correspondent pas à la notation utilisée pour définir $\mathbf{A}$ et $\mathbf{D}$. On doit donc réécrire les éléments de ces matrices en utilisant d'autres lettres pour les indices.

$$A_{im} = B_{ik}C_{km} \qquad\qquad D_{mj} = E_{mk}F_{kj}$$

Ces deux expressions comportent l'indice muet k. Le même indice désignerait deux sommes distinctes. Ainsi, on ne peut pas directement écrire,

$$G_{ij} = A_{im}D_{mj} \neq (B_{ik}C_{km})(E_{mk}F_{kj}) = B_{ik}C_{km}E_{mk}F_{kj}$$

La somme sur l'indice k poserait problème, car il apparait quatre fois !

On introduit alors de nouveaux caractères, autant que nécessaire, pour ne pas associer accidentellement 2 indices qui n'ont rien à voir ensemble. Dans le cas du produit de $\mathbf{A}$ et $\mathbf{D}$ on devrait faire quelque chose comme suit

$$G_{ij} = A_{im}D_{mj} = (B_{ik}C_{km})(E_{ml}F_{lj}) = B_{ik}C_{km}E_{ml}F_{lj}.$$

Les indices muets viennent par pairs. Cela correspond bien à une multiplication de plusieurs matrices.

7.6 Mélanger les notations

Il arrive parfois qu'on veuille mélanger les notations vectorielle et indicielle. En restant rigoureux, on évitera de faire des erreurs mathématiques et conceptuelles. Par exemple, cette égalité n'est pas valable

$$\mathbf{M} \neq M_{ij}.$$

La matrice $\mathbf{M}$ n'est pas égale à tous ses éléments ! Lorsqu'on désire spécifier l'élément du résultat d'un calcul, on peut mettre l'expression entre parenthèses et le décorer d'indices. Par exemple, dans le cas du produit $\mathbf{S} = \mathbf{MQ}$, on peut écrire,

$$S_{ij} = (\mathbf{M} \cdot \mathbf{Q})_{ij}$$

Il est rigoureux de mélanger les notations si les résultats sont strictement les mêmes. En particulier dans le cas du produit scalaire qui donne ... un scalaire.

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} = q_i r_i$$

8 Les dérivées

La notation indicielle est également utile dans le contexte du calcul différentiel vectoriel.

8.1 Gradient

On peut exprimer le gradient d'une fonction en notation indicielle. Par exemple, si en notation vectorielle on a,

$$\mathbf{a} = \nabla f(\mathbf{r})$$

la composante i du gradient est

$$a_i = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r_i}.$$

Ce résultat est à l'origine de l'abus de notation suivante pour exprimer un gradient

$$\nabla f(\mathbf{r}) = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\mathbf{r}}.$$

8.2 Différentielle d'une fonction à n variables

Considérons une fonction à n variables

$$f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = f(\{x_i\}).$$

On peut rapidement exprimer sa différentielle

$$\mathrm{d}f = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i}\,\mathrm{d}x_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}\,\mathrm{d}x_i\,.$$

Si tous les x_i sont dépendants de la variable t on peut exprimer la dérivée de f par rapport à t

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial x_i}\dot{x}_i.$$

Ce résultat s'applique en particulier aux fonctions qui dépendent de la position. Par exemple, si on a $f(\mathbf{r}(\mathbf{t}))$ et qu'on désire calculer la dérivée temporelle de f on peut écrire

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial r_i}\frac{\mathrm{d}r_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{r}}{\mathrm{d}t}.$$

Dans la dernière égalité, on a simplement exprimé la somme sur i comme un produit scalaire.

Expression	Ordre	Vectorielle	Explicite	Indicielle	Einstein
Scalaire	0	k	k	k	k
Vecteur	1	$\mathbf{r}$	$\begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$	r_i	r_i
Matrice	2	$\mathbf{M}$	$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{pmatrix}$	M_{ij}	M_{ij}
Tenseur Ordre 3	3	—	—	M_{ijk}	M_{ijk}
Tenseur Ordre n	n	—	—	$M_{ijk...}$	$M_{ijk...}$
Matrice identité	2	$\mathbf{I}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	δ_{ij}	δ_{ij}
Levi-Civita	3	—	$\epsilon_{1ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$, $\epsilon_{2ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\epsilon_{3ij} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	ϵ_{ijk}	ϵ_{ijk}

TABLE C.1 – Liste de tenseurs communs exprimés sous plusieurs formes. On suppose un espace à 3 dimensions.

Opération	Vectorielle	Explicite	Indicielle	Einstein
Transposée	$\mathbf{Q} = \mathbf{M}^\intercal$	$\begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{21} & M_{31} \\ M_{12} & M_{22} & M_{32} \\ M_{13} & M_{23} & M_{33} \end{pmatrix}$	$Q_{ij} = M_{ji}$	$Q_{ij} = M_{ji}$
Addition	$\mathbf{S} = \mathbf{M} + \mathbf{Q}$	$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}+S_{11} & M_{12}+S_{12} & M_{13}+S_{13} \\ M_{21}+S_{21} & M_{22}+S_{22} & M_{23}+S_{23} \\ M_{31}+S_{31} & M_{32}+S_{32} & M_{33}+S_{33} \end{pmatrix}$	$S_{ij} = M_{ij} + Q_{ij}$	$S_{ij} = M_{ij} + Q_{ij}$
Produit scalaire	$k = \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}$	$k = \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix} = q_1 r_1 + q_2 r_2 + q_3 r_3$	$k = \sum_i q_i r_i$	$k = q_i r_i$
Produit matrice-vecteur	$\mathbf{q} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{r}$	$\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}r_1 + M_{12}r_2 + M_{13}r_3 \\ M_{21}r_1 + M_{22}r_2 + M_{23}r_3 \\ M_{31}r_1 + M_{32}r_2 + M_{33}r_3 \end{pmatrix}$	$q_i = \sum_j M_{ij} r_j$	$q_i = M_{ij} r_j$
Produit identique	$\mathbf{r} = \mathbf{I} \cdot \mathbf{r}$	$\begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$	$r_i = \sum_j \delta_{ij} r_j$	$r_i = \delta_{ij} r_j$
Produit matriciel	$\mathbf{S} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{Q}$	$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} \end{pmatrix} = \dots$	$S_{ij} = \sum_k M_{ik} Q_{kj}$	$S_{ij} = M_{ik} Q_{kj}$
Carré d'une matrice	$\mathbf{S} = \mathbf{M}^2$	$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{pmatrix} = \dots$	$S_{ij} = \sum_k M_{ik} M_{kj}$	$S_{ij} = M_{ik} M_{kj}$
Produit quadratique	$k = \mathbf{q} \cdot \mathbf{M} \cdot \mathbf{r}$	$k = \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix} = M_{11} q_1 r_1 + M_{12} q_1 r_2 + \dots$	$k = \sum_{ij} M_{ij} q_i r_j$	$k = M_{ij} q_i r_j$
Produit vectoriel	$\mathbf{p} = \mathbf{q} \times \mathbf{r}$	$\begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{u}}_1 & \hat{\mathbf{u}}_2 & \hat{\mathbf{u}}_3 \\ q_1 & q_2 & q_3 \\ r_1 & r_2 & r_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_2 r_3 - q_3 r_2 \\ q_3 r_1 - q_1 r_3 \\ q_1 r_2 - q_2 r_1 \end{pmatrix}$	$p_i = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} q_j r_k$	$p_i = \epsilon_{ijk} q_j r_k$
Gradient	$\mathbf{g} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \nabla f$	$\begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial f / \partial r_1 \\ \partial f / \partial r_2 \\ \partial f / \partial r_3 \end{pmatrix}$	$g_i = \frac{\partial f}{\partial r_i}$	$g_i = \frac{\partial f}{\partial r_i}$

TABLE C.2 – Liste d'opérations tensorielles courantes sous plusieurs formes. On suppose un espace à 3 dimensions.

Annexe D

Variables aléatoires (en rédaction)

Soit x une variable aléatoire. La seule chose que l'on peut faire avec une variable aléatoire est de l'échantillonner, c'est-à-dire lui demander qu'elle est sa valeur. À chaque fois qu'on effectue un échantillonnage, la variable aléatoire nous retourne une valeur aléatoire parmi un ensemble de valeurs possibles.

Une variable aléatoire ne peut pas retourner n'importe quelle valeur. Les valeurs qu'elle peut retourner sont imposées. Par exemple, lors d'un jeu de pile ou face, les deux valeurs possibles sont pile et face. Pour un dé à six faces, les valeurs possibles sont les nombres de 1 à 6.

En échantillonnant plusieurs fois une variable aléatoire, on peut acquérir de l'information sur celle-ci. Les informations caractéristiques les plus fondamentales sont l'espérance et la variance.

1 Espérance

La première information caractéristique qu'on peut tenter d'obtenir à propos d'une variable aléatoire est son espérance. L'espérance d'une variable aléatoire correspond à la valeur moyenne qu'on obtiendrait si on pouvait effectuer un nombre infini d'échantillons. Pour une variable aléatoire x on note l'espérance

$$\mathbb{E}[x].$$

L'espérance est linéaire, c'est-à-dire que l'espérance d'une variable renormalisée ax est simplement

$$\mathbb{E}[ax] = a\mathbb{E}[x] \tag{D.1}$$

et que l'espérance de la somme de deux variables aléatoires est simplement

$$\mathbb{E}[x + y] = \mathbb{E}[x] + \mathbb{E}[y]. \tag{D.2}$$

Mentionnons que l'espérance d'une quantité qui n'est pas aléatoire est simplement égale à cette quantité

$$\mathbb{E}[a] = a.$$

2 Variance

Chaque échantillon de x peut retourner différentes valeurs en fonction de sa distribution. La variance d'une variable aléatoire caractérise en quelque sorte, la différence moyenne entre les résultats aléatoires avec l'espérance. On parle aussi de la largeur de cette distribution. Pour calculer la variance, on doit d'abord connaitre l'espérance. Ensuite, on échantillonne x et on calcule le carré de la différence entre l'échantillon et l'espérance. En faisant cela un très grand nombre de fois ça revient à calculer

$$\sigma_x^2 = \mathrm{Var}(x) = \mathbb{E}\Big[(x - \mathbb{E}[x])^2\Big].$$

La variance peut également être exprimée grâce à l'espérance du carré de la variable aléatoire

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(x) &= \mathbb{E}\big[x^2 + \mathbb{E}^2[x] - 2x\mathbb{E}[x]\big] \\ &= \mathbb{E}[x^2] - \mathbb{E}^2[x] - 2\mathbb{E}[x]\mathbb{E}[x] \\ &= \mathbb{E}[x^2] - \mathbb{E}^2[x].\end{aligned}$$

Comme pour l'espérance, établissons quelques propriétés. D'abord, la variance d'une variable aléatoire renormalisée ax est quadratique avec le scalaire a

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(ax) &= \mathbb{E}\Big[(ax - \mathbb{E}[ax])^2\Big] \\ &= \mathbb{E}\Big[a^2(x - \mathbb{E}[x])^2\Big] \\ &= a^2\,\mathrm{Var}(x).\end{aligned} \tag{D.3}$$

Ensuite, la variance d'une somme de variables aléatoires est donnée par les variances de chacune

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}(x+y) &= \mathbb{E}\Big[(x + y - \mathbb{E}[x+y])^2\Big] \\ &= \mathbb{E}\Big[(x - \mathbb{E}[x] + y - \mathbb{E}[y])^2\Big] \\ &= \mathbb{E}\Big[(x - \mathbb{E}[x])^2 + (y - \mathbb{E}[y])^2 + 2(x - \mathbb{E}[x])(y - \mathbb{E}[y])\Big] \\ &= \mathrm{Var}(x) + \mathrm{Var}(y) + 2\mathrm{Covar}(x,y)\end{aligned} \tag{D.4}$$

auxquelles on ajoute ce qu'on appelle la covariance

$$\mathrm{Covar}(x,y) = \mathbb{E}[(x - \mathbb{E}[x])(y - \mathbb{E}[y])].$$

qui est non nulle si les deux variables aléatoires ne sont pas complètement indépendantes. Dans le cas, où les deux variables aléatoires sont indépendantes, la covariance entre les deux variables est nulle et on a simplement

$$\mathrm{Var}(x+y) = \mathrm{Var}(x) + \mathrm{Var}(y) \quad \text{pour des variables indépendantes.}$$

3 Covariance

La covariance entre deux variables aléatoires x et y permet de décrire si elles sont indépendantes l'une de l'autre ou si le résultat obtenu sur l'une influence d'une quelconque manière le résultat de l'autre

$$\mathrm{Covar}(x,y) = \mathbb{E}[(x - \mathbb{E}[x])(y - \mathbb{E}[y])].$$

On peut également exprimer la covariance à l'aide de l'espérance du produit des variables aléatoires et du produit de leurs espérances respectives

$$\begin{aligned}\mathrm{Covar}(x,y) &= \mathbb{E}[xy - x\mathbb{E}[y] - y\mathbb{E}[x] + \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[y]] \\ &= \mathbb{E}[xy] - \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[y].\end{aligned}$$

Établissons quelques propriétés de la covariance. La covariance est linéaire avec la renormalisation de chacune des variables aléatoires

$$\mathrm{Covar}(ax, by) = ab\,\mathrm{Covar}(x,y) \tag{D.5}$$

Cela implique également que

$$\begin{aligned}\text{Covar}(x, y+z) &= \mathbb{E}[x(y+z)] - \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[y+z] \\ &= \mathbb{E}[xy] - \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[y] + \mathbb{E}[xz] - \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[z] \\ &= \text{Covar}(x, y) + \text{Covar}(x, z). \end{aligned} \tag{D.6}$$

Finalement, notons que la covariance d'une variable aléatoire avec elle-même revient à sa variance

$$\text{Covar}(x, x) = \text{Var}(x)$$

et que la variance est symétrique sous l'échange des deux variables aléatoires

$$\text{Covar}(x, y) = \text{Covar}(y, x).$$

4 Estimation de l'espérance

Pour obtenir de l'information sur une variable aléatoire x on effectue un échantillonnage, c'est-à-dire qu'on interroge cette variable aléatoire qui nous retourne une valeur. On note un échantillon, aussi appelé réalisation, de la variable aléatoire comme

$$x^{(i)}$$

où l'indice i indique qu'il s'agit du $i^{\text{ième}}$ échantillon.

Une fois qu'on a accumulé plusieurs échantillons, notons ce nombre N, on peut calculer la valeur moyenne à partir de ceux-ci. Cela nous permet en fait d'estimer l'espérance de la variable aléatoire. On note cette estimation de l'espérance

$$\tilde{\mathbb{E}}[x] = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x^{(i)}.$$

On fera référence à cette quantité comme une valeur moyenne ou encore comme l'estimation de l'espérance. Comme il s'agit d'une estimation, on a donc que

$$\mathbb{E}[x] \approx \tilde{\mathbb{E}}[x]$$

et non une égalité. En effet, si on effectue plusieurs rondes d'échantillonnages de la variable x on obtiendra plusieurs estimations. Notons les $\tilde{\mathbb{E}}^{(1)}[x]$, $\tilde{\mathbb{E}}^{(2)}[x]$ et $\tilde{\mathbb{E}}^{(j)}[x]$. Chacune de ces estimations est donnée par

$$\tilde{\mathbb{E}}^{(j)}[x] = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x^{(i,j)}$$

où $x^{(i,j)}$ est la $i^{\text{ième}}$ réalisation de la variable aléatoire pour la ronde j. Celles-ci sont sans doute similaires, mais fort probablement différentes. Si on fait ce processus plusieurs fois, on constate que l'estimation $\tilde{\mathbb{E}}^{(j)}[x]$ est en fait, elle aussi, une variable aléatoire. Ainsi, si on considère qu'on peut échantillonner $\tilde{\mathbb{E}}[x]$, cette variable aléatoire est une somme de variables aléatoires

$$\tilde{\mathbb{E}}[x] = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$$

où x_i représente la variable aléatoire qui sera échantillonnée à la $i^{\text{ième}}$ étape.

La figure D.1 aide à illustrer cela. On y considère plusieurs rondes d'échantillonnage. La ronde j permet de faire une estimation de l'espérance $\tilde{\mathbb{E}}^{(j)}[x]$. Les échantillons pris à la $i^{\text{ième}}$ étape peuvent être considéré

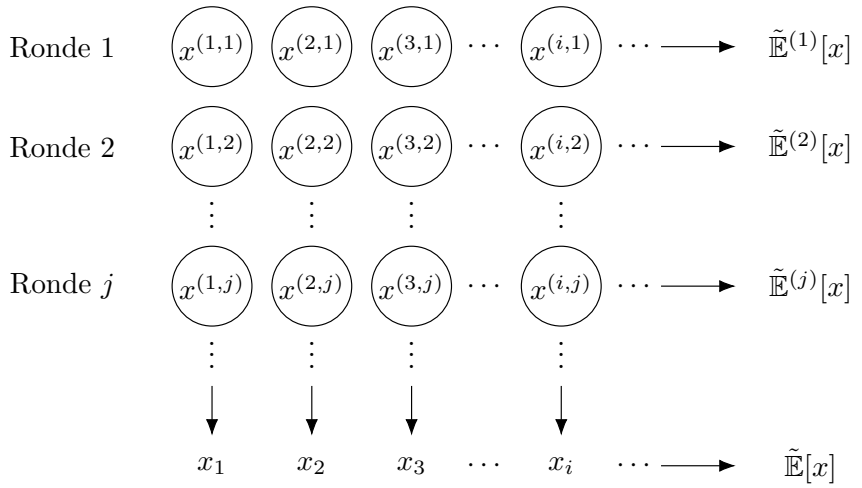


FIGURE D.1 – Une variable aléatoire x est échantillonnée lors de plusieurs rondes. La valeur moyenne calculée à chaque ronde peut être vue comme un échantillon d'une variable aléatoire $\mathbb{E}[x]$. Celle-ci apparait comme une somme des variables aléatoires x_i.

comme étant des réalisations de la variable aléatoire x_i. Ainsi, l'espérance $\tilde{\mathbb{E}}[x]$ est en fait une somme de variables aléatoires.

Les distributions qui caractérisent chacune des variables aléatoires x_i sont les mêmes que pour x. On conclut donc que

$$\mathbb{E}[x_i] = \mathbb{E}[x] \tag{D.7}$$

et

$$\mathrm{Var}(x_i) = \mathrm{Var}(x). \tag{D.8}$$

Finalement, on considéra qu'un résultat obtenu à la $i^{\text{ième}}$ étape est indépendant de celui obtenu à la $j^{\text{ième}}$, sauf si $j = i$. On résume cela en spécifiant la convariance entre les échantillons pris aux étapes i et j

$$\mathrm{Covar}(x_i, x_j) = \mathrm{Var}(x_i)\delta_{ij}. \tag{D.9}$$

4.1 Espérance

Ainsi, on peut utiliser les propriétés D.1 et D.2 de l'espérance pour exprimer l'espérance de l'estimation de l'espérance de x

$$\mathbb{E}[\tilde{\mathbb{E}}[x]] = \mathbb{E}\left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i\right] = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathbb{E}[x_i]$$

En utilisant le fait que les distributions de x et x_i sont identiques (équation D.7), on peut conclure que l'espérance de la valeur moyenne d'une ronde d'échantillonnage est égale, sans surprise, à l'espérance de la variable aléatoire x

$$\mathbb{E}[\tilde{\mathbb{E}}[x]] = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathbb{E}[x] = \mathbb{E}[x].$$

4.2 Variance

Il est surtout intéressant d'exprimer la variance de l'estimation de l'espérance. En supposant que chaque échantillon de la variable x est indépendant des autres (équation D.9) et à l'aide des propriétés D.3 et D.4, on peut écrire

$$\mathrm{Var}(\tilde{\mathbb{E}}[x]) = \mathrm{Var}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i\right) = \frac{1}{N^2}\sum_{i=1}^{N}\mathrm{Var}(x_i).$$

Encore en utilisant le fait que les distributions de x et x_i sont identiques (équation D.7) on obtient que la variance de l'estimation de l'espérance de x est donnée par

$$\mathrm{Var}(\tilde{\mathbb{E}}[x]) = \frac{1}{N}\mathrm{Var}(x).$$

Ainsi, lorsqu'on augmente le nombre d'échantillons N pour calculer une valeur moyenne, la variance sur celle-ci diminue comme l'inverse de N. Autrement dit, plus le nombre d'échantillons est grand, plus la valeur moyenne devrait être proche de l'espérance. Cela est cohérent avec notre intuition qu'on peut améliorer la précision d'une estimation en accumulant plus de données.

4.3 Covariance

On peut également s'intéresser à la covariance entre des estimations d'espérance pour deux variables aléatoires. Ici, il est important de noter que lorsque plusieurs variables aléatoires sont impliquées, on considère un échantillon comme comprenant une valeur pour chaque variable aléatoire. Ainsi pour des variables aléatoires x et y, un échantillon consiste en

$$\{x^{(i)}, y^{(i)}\}.$$

En utilisant une approche similaire à celle qu'on a utilisée plutôt, on peut identifier les estimations des espérances de x et y comme des sommes de variables aléatoires

$$\tilde{\mathbb{E}}[x] = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i \quad \text{et} \quad \tilde{\mathbb{E}}[y] = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} y_j$$

La covariance entre les estimations des espérances pour deux variables aléatoires s'exprime donc comme

$$\mathrm{Covar}\Big(\tilde{\mathbb{E}}[x], \tilde{\mathbb{E}}[y]\Big) = \mathrm{Covar}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i, \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} y_i\right)$$

En utilisant les propriétés D.5 et D.6, on peut réécrire cette covariance en fonction de la covariance entre x_i et y_j

$$\mathrm{Covar}\Big(\tilde{\mathbb{E}}[x], \tilde{\mathbb{E}}[y]\Big) = \frac{1}{N^2}\sum_{ij}\mathrm{Covar}(x_i, y_j)$$

Or, si on suppose que les échantillons pris à des étapes différentes sont indépendants, on doit avoir

$$\mathrm{Covar}(x_i, y_j) = \mathrm{Covar}(x_i, y_i)\delta_{ij} = \mathrm{Covar}(x, y)\delta_{ij}.$$

Ainsi, la covariance entre les estimations des espérances pour deux variables aléatoires x et y est donnée par

$$\mathrm{Covar}\Big(\tilde{\mathbb{E}}[x], \tilde{\mathbb{E}}[y]\Big) = \frac{1}{N}\mathrm{Covar}(x, y).$$

Ce résultat indique, qu'en auguementant le nombre d'échantillons, les estimations des espérances de x et y sont de moins en moins affectées par la covariance entre celle-ci.

5 Estimation de la variance

Pour estimer la variance d'une variable aléatoire, on doit d'abord en connaitre l'espérance, ou du moins avoir fait une bonne estimation de celle-ci. Assumons qu'on la connaisse. L'estimation de la variance à partir de N d'échantillons $x^{(i)}$ s'obtient en calculant

$$\tilde{\mathrm{V}}\mathrm{ar}(x) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\Big(x^{(i)} - \mathbb{E}[x]\Big)^2.$$

6 Estimation de la covariance

Pour estimer la covariance entre deux variables aléatoires, on doit d'abord connaitre leurs espérances. L'estimation de la covariance à partir de N d'échantillons $\{x^{(i)}, y^{(i)}\}$ s'obtient en calculant

$$\tilde{\mathrm{C}}\mathrm{ovar}(x) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\Big(x^{(i)} - \mathbb{E}[x]\Big)\Big(y^{(i)} - \mathbb{E}[y]\Big).$$