HAL
open science

Simulation de systèmes quantiques sur un ordinateur quantique réaliste

Benjamin Lévi

To cite this version:

Benjamin Lévi. Simulation de systèmes quantiques sur un ordinateur quantique réaliste. Physique [physics]. Université Paris-Diderot - Paris VII, 2004. Français. NNT : . tel-00007592

HAL Id: tel-00007592

https://theses.hal.science/tel-00007592v1

Submitted on 30 Nov 2004

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ PARIS 7 – DENIS DIDEROT
UFR de Physique

THÈSE

Pour l'obtention du Diplôme de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS 7
SPÉCIALITÉ : PHYSIQUE THÉORIQUE

Présentée et soutenue publiquement par

Benjamin Lévi

le 9 novembre 2004

Titre :

Simulation de systèmes quantiques sur un ordinateur quantique réaliste

Directeurs de thèse :

Bertrand Georgeot
Dima Shepelyansky

JURY

Pr Gernot Alber	Examinateur
Dr Denis Feinberg	Rapporteur
Dr Bertrand Georgeot	Directeur de thèse
Pr Philippe Lafarge	Président du jury
Dr Dima Shepelyansky	Co-directeur de thèse
Dr Dietmar Weinmann	Rapporteur

À Manuel

Remerciements

Je voudrais tout d'abord chaleureusement remercier Bertrand Georgeot et Dima Shepelyansky pour leur accompagnement tout au long de cette thèse. J'ai beaucoup apprécié leur disponibilité, leur implication et leur gentillesse.

Ma reconnaissance va également à Denis Feinberg et Dietmar Weinmann pour avoir accepté la lourde tâche d'être rapporteurs de ma thèse malgré un délai assez court, ainsi qu'à Philippe Lafarge et Gernot Alber pour avoir accepté de faire partie du jury.

Je remercie l'IRSAMC de m'avoir accueilli pendant ces trois années, et plus particulièrement le Laboratoire de Physique Théorique et son directeur Didier Poilblanc. Je voudrais également exprimer ma gratitude à Sylvia Scaldaferro, Gisèle Dedieu, Nicolas Elefantis et Patrick Pérez pour leur efficacité et leur amabilité.

Merci aussi à mon école doctorale, et particulièrement Yves Charon et Agnès Fercoq, de m'avoir accueilli en DEA et de m'avoir permis ensuite de partir vers le grand sud. À ce propos, merci également à l'école doctorale de physique de Toulouse de m'avoir accordé un monitorat malgré mon appartenance à une autre école.

Un grand merci également à Klaus Frahm pour les nombreuses discussions physiques ou non, à Marcello Terraneo pour m'avoir supporté dans le bureau pendant deux ans et pour s'être sacrifié pendant tout ce temps en me donnant son chocolat à la cantine, à Stefano Bettelli, magicien des temps modernes, pour sa patience et ses explications informatiques toujours limpides, et enfin à Pierre-Henri Chavanis, Leang Ming Ma et Raphaël Cherrier pour leur bonne humeur communicative.

Je tiens à saluer aussi Eleonora Bettelli, Olivier Chiappa, Catherine Armengaud, Claire Vallat, Vianney Desoutter, David Magnoux, Claudine Colnard, Fabien Mégi, Julien Sopik, Guillaume Roux, Giampaolo Cristadoro, Jae-Weon Lee, Andrei Pomeransky, José Lages, Éric Giglio et Suriyanarayanan Kothandaraman pour tous les bons moments. Que tous ceux que j'ai oublié ici me pardonnent !

Enfin, je voudrais remercier mes parents et ma soeur pour leur soutien qui dure depuis bien avant le début de cette thèse, et mon chat, animal quantique par excellence, qui n'en pense pas moins sous ses airs placides. Je les aime tous beaucoup.

Table des matières

1 Introduction **9**

2 Informatique quantique **13**
2.1 Opérations quantiques 13
2.1.1 Opérations sur un qubit 13
2.1.2 Opérations élémentaires et universalité 16
2.1.3 Opérations contrôlées 17
2.2 Transformée de Fourier quantique 21
2.2.1 Algorithme de la Transformée de Fourier 21
2.2.2 Estimation de phase 24
2.3 Recherche quantique 26
2.3.1 Algorithme de Grover 26
2.3.2 Amplification d'amplitude 31
2.4 Simulations de systèmes quantiques 33

3 Simulation du rotateur pulsé **37**
3.1 Applications Quantiques : exemple du rotateur pulsé 37
3.1.1 Rotateur pulsé classique 37
3.1.2 Rotateur pulsé quantique 47
3.1.3 Localisation dynamique et localisation d'Anderson . . 52
3.2 Résultats sur le rotateur pulsé 60
3.3 Publication I 63

4 Simulation du Harper pulsé **75**
4.1 Le modèle de Harper 75
4.1.1 Modèle de Harper 75
4.1.2 Modèle de Harper pulsé 76
4.2 Résultats sur le modèle de Harper pulsé 78
4.3 Publication II 81

5 Conclusion **103**

A Fonctions de Wigner et Husimi **105**
A.1 Fonction de distribution générale 105
A.2 Distribution de Wigner 107
A.3 Distribution de Husimi 111
A.4 Relation entre les distributions de Wigner et de Husimi . . . 115
A.5 Distribution de Wigner discrète 116
A.6 Distribution de Husimi discrète 119

Chapitre 1

Introduction

Historiquement, la première évocation du concept d'ordinateur quantique remonte à des travaux du début des années 1980, en particulier ceux de Richard Feynman [12, 34, 35]. Il s'agissait alors de répondre à la question suivante : quel type d'ordinateur est le plus adapté pour simuler un système physique quantique ? Pour qu'un tel ordinateur soit réalisable en pratique, les ressources nécessaires (taille, temps ou énergie) ne doivent pas croître exponentiellement avec la taille du système à simuler. Dans le cas d'un ordinateur classique standard, ce souhait interdit notamment de stocker les états intermédiaires de la simulation. En effet, pour un système à N corps, le nombre d'amplitudes complexes nécessaires pour caractériser complètement un état de l'espace de Hilbert croît exponentiellement avec le nombre de particules (si le nombre de niveaux par particule est fini). On peut éventuellement envisager de simuler le système quantique par un ordinateur classique probabiliste, c'est-à-dire essayer de reproduire fidèlement les résultats de n'importe quelle mesure sur le système avec les mêmes probabilités. Mais une fois encore, il s'avère que cela n'est pas possible car cela revient à utiliser un modèle à variables cachées, ce qui est en désaccord avec les données expérimentales sur la violation des inégalités de Bell. Pour simuler efficacement un système quantique, il faut donc faire appel à un ordinateur qui fonctionne lui aussi selon les lois de la mécanique quantique.

Ce concept d'ordinateur quantique fut repris en 1985 par David Deutsch [29], alors motivé par un problème d'informatique théorique : comment définir ce qui est calculable ? Le paradigme en vigueur était celui résumé laconiquement par l'hypothèse de Turing-Church forte :

> Tout procédé algorithmique peut être simulé efficacement en utilisant une machine de Turing probabiliste.

Dit autrement, tous les ordinateurs sont équivalents à une machine de Turing probabiliste, et celle-ci définit ce qui est calculable ou non. Cette définition de ce qu'est un algorithme est purement heuristique, et l'objectif de Deutsch

était d'arriver à l'asseoir (elle ou une version modifiée) au moins sur des bases physiques. Comme les lois physiques fondamentales sont quantiques, il fut tout naturellement amené lui aussi à imaginer un ordinateur quantique. De fait, il exhiba un problème simple qui peut être résolu efficacement sur une telle machine, mais qui n'admet pas de solution efficace sur un ordinateur classique. Ceci met à mal l'hypothèse de Turing-Church, et suggère que les ordinateurs quantiques sont effectivement plus puissants que leurs homologues classiques.

Par la suite, ces résultats ont été repris et améliorés par d'autres. En 1994, Peter Shor a montré que le problème de la factorisation d'un entier pouvait être résolu efficacement sur un ordinateur quantique [83, 85]. Plus que toutes les autres, cette découverte a marqué le début de l'essor de l'informatique quantique. En effet la factorisation est un problème réputé difficile, dont on ne connaît pas à l'heure actuelle de solution efficace classique (certains pensent même qu'il n'en existe pas). Ce résultat remarquable a été suivi en 1996 par l'algorithme de Grover, qui permet d'effectuer une recherche dans une base de données non structurée [47, 48]. Bien que le gain en efficacité de cet algorithme soit moins spectaculaire que dans le cas de la factorisation, son vaste champ d'application en fait une méthode importante. Par delà l'étude du calcul quantique, d'autres succès concernent la cryptographie quantique et la téléportation quantique. Depuis ces travaux, le domaine de l'information quantique a attiré une très grande attention dans la communauté scientifique (pour une référence générale voir [71, 75, 89, 11]).

Comment expliquer l'avantage de l'informatique quantique sur la logique booléenne classique ? La première constatation est que l'état d'un ordinateur quantique est caractérisé par un ensemble de variables continues. Cela pourrait laisser supposer qu'il s'agit là d'un ordinateur analogique. Contrairement à un ordinateur digital, un ordinateur analogique utilise une représentation physique de l'information basée sur des degrés de liberté continus. À première vue, ces calculateurs possèdent des ressources illimitées puisque des variables continues peuvent stocker une quantité d'information infinie. Le corollaire est qu'ils sont théoriquement capables de résoudre de manière efficace des problèmes jugés difficiles, semblant ainsi violer la thèse de Turing-Church. Cependant, la prise en compte du bruit inhérent à toute réalisation physique rend le nombre d'états distinguables finis, et suffit à annihiler leurs avantages dans tous les cas.

Qu'en est-il pour les ordinateurs quantique ? Tout d'abord, il faut remarquer que la discrétisation des niveaux d'énergie apportée par la mécanique quantique n'implique pas que l'ordinateur soit digital. Un ordinateur digital est une machine qui représente les nombres sous la forme d'une suite de chiffre. Afin d'illustrer la différence, considérons un premier ordinateur qui

utilise les niveaux d'énergie d'un oscillateur harmonique pour représenter les différents nombres (quantique mais non digital), et un deuxième qui utilise pour cela un ensemble de n systèmes à deux niveaux (quantique digital). Pour une même taille de l'espace de Hilbert égale à 2^n, le premier doit pouvoir gérer des états dont l'énergie atteint $2^n\hbar\omega$, ce qui croît exponentiellement avec n, tandis que le second ne voit pas son énergie dépasser $n\hbar\omega$. Seule la représentation digitale de l'information permet donc d'envisager une implémentation physique réaliste. C'est pourquoi un ordinateur quantique est conçu comme un ensemble de systèmes à deux niveaux, les *qubits* (pour *quantum bit*).

Pour un ordinateur quantique constitué de qubits, la mesure du registre fournit effectivement un nombre digital (une suite de 0 et de 1), qui correspond à un des états de base. Mais lors du calcul, l'état général du registre est une superposition quelconque de ces états de base, avec des coefficients qui sont des variables continues. Comme souligné auparavant, l'ordinateur quantique se rapproche en cela des ordinateurs analogiques. Toutefois, une particularité lui permet d'éviter les écueils propres à ce genre : de manière surprenante, l'effet du bruit peut être lui aussi digitalisé. En 1996, il s'est en effet avéré qu'il était possible grâce à des codes correcteurs de rectifier un ensemble continu d'erreurs, et ceci sans même mesurer l'état du registre principal [84, 88]. De plus, il semble exister un seuil d'erreur en dessous duquel la procédure de correction corrige plus de bruit qu'elle n'en produit elle-même. Dans ces conditions, les codes correcteurs d'erreurs quantiques permettent à ces ordinateurs de garder leur efficacité même en présence d'une petite quantité de bruit.

Même si ce sont les nouveaux algorithmes destinés à résoudre des problèmes d'informatique théorique qui ont placé les ordinateurs quantiques sous les feux de la rampe, la simulation efficace des systèmes physiques quantiques reste leur tâche de prédilection, ce pour quoi ils ont été conçus à l'origine. Récemment, de nombreux algorithmes ont été proposés dans ce sens, notamment pour simuler des applications quantiques, comme l'application du boulanger ou le rotateur pulsé quantique, et en particulier par mon équipe à Toulouse. Ces modèles présentent des propriétés de chaos quantique, l'analogue quantique du chaos classique, et possèdent de nombreuses caractéristiques de systèmes complexes, comme la localisation ou l'ergodicité, et sont correctement décrits par la théorie des matrices aléatoires. De plus, le faible nombre de qubits et d'opérations élémentaires requis par ces algorithmes de simulation en font des candidats idéaux pour les ordinateurs qui seront construits dans un futur proche, pour lesquels le nombre de qubits sera restreint et la durée d'exécution limitée par un faible temps de cohérence.

En effet, expérimentalement divers systèmes ont été proposés pour essayer de réaliser un ordinateur quantique. On peut citer les pièges à ions (3 qubits à l'heure actuelle) ou les cavités QED (2 qubits). En physique du solide, les circuits quantiques supra-conducteurs à base de jonctions Josephson permettent d'encoder l'état d'un qubit dans la charge ou le flux. Mais pour l'instant, c'est dans le domaine de la résonance magnétique nucléaire que les expériences sont les plus avancées, et une factorisation a déjà été réalisée sur un ordinateur de 7 qubits. Avec cette technique, ce sont les spins nucléaires d'une molécule qui servent de support aux qubits, et l'on peut les manipuler en appliquant un champ magnétique modulé. Cependant, la résonance magnétique nucléaire en phase liquide n'est malheureusement pas utilisable à grande échelle car le signal mesuré chute exponentiellement avec le nombre de spins dans la molécule. Ainsi, il y a pour l'instant un contraste élevé entre la théorie du calcul quantique, qui s'intéresse principalement au comportement asymptotique des algorithmes pour un très grand nombre de qubits, et les expériences, qui sont pour l'instant limitées à quelques qubits. On voit donc que les algorithmes de simulation quantique qui permettent d'obtenir des résultats pertinents même sur des ordinateurs n'ayant qu'un petit nombre de qubits seront bien adaptés aux ordinateurs quantiques qui seront construits dans un futur proche.

Cependant, même si la simulation est elle-même efficace, il est important de savoir quelles quantités physiques peuvent être calculées de manière efficace. En effet, à la différence d'un ordinateur classique, on obtient à la fin du calcul une superposition d'états quantiques, et une simple mesure ne sélectionne que l'un de ces états aléatoirement. Une méthode consisterait à répéter la simulation un certain nombre de fois afin d'en déduire statistiquement les valeurs des différentes amplitudes. Mais cette façon de procéder n'est pas valable dans le cas général, puisque pour une fonction d'onde quelconque cela nécessiterait un nombre de simulations de l'ordre de la taille de l'espace de Hilbert. La conception de méthodes pour extraire efficacement des quantités physiques intéressantes est donc un point crucial. De plus, un ordinateur quantique réel ne sera pas exempt de défauts. Il peut y avoir par exemple des petites erreurs aléatoires dans l'implémentation des opérations de base ou des couplages résiduels entre les qubits même en l'absence d'opérations. Il est donc utile de connaître les effets de telles imperfections sur les résultats fournis par la simulation. Ce travail de thèse apporte des éléments de réponse à de telles questions : des algorithmes quantiques spécifiques ont été construits et analysés pour deux modèles d'application quantique, le rotateur pulsé et le Harper pulsé. Les observables mesurables ont été déterminées, et leur comportement vis-à-vis des imperfections étudié analytiquement et numériquement.

Chapitre 2

Informatique quantique

Ce chapitre présente brièvement le domaine de l'informatique quantique, ainsi que les notions de calcul quantique nécessaires à la compréhension de cette thèse. Pour une introduction plus approfondie, voir les références [11, 71, 75].

2.1 Opérations quantiques

Un algorithme quantique peut se décrire comme une suite d'opérateurs unitaires locaux élémentaires, appelés aussi portes quantiques, suivie de mesures quantiques. Le nombre d'opérations élémentaires requises rapporté à la taille des données définit la complexité de l'algorithme. Si ce nombre croît comme l'exponentielle de la taille des données, l'algorithme est dit inefficace ; il est efficace si la croissance s'effectue de manière polynomiale. Il est à noter que la complexité totale (et donc l'efficacité) doit tenir compte des mesures quantiques effectuées et de l'observable choisie. Comme mentionné dans l'introduction, le *qubit* (quantum bit) est l'objet fondamental du calcul quantique, et représente l'unité de support de l'information quantique. C'est un système quantique à 2 niveaux, appelés usuellement $|0\rangle$ et $|1\rangle$. Contrairement à un bit classique, l'état général d'un qubit est une superposition des deux états de base :

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle \text{ avec } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

2.1.1 Opérations sur un qubit

Une opération quelconque sur un qubit est décrite par une matrice unitaire 2×2, et peut être développée sur la base constituée de l'identité et des matrices de Pauli :

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Une opération particulièrement importante est la transformation d'Hadamard

$$H = \frac{X+Z}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

La transformation d'Hadamard permet notamment de passer de la base propre de Z ($|0\rangle$,$|1\rangle$) à celle de X ($(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$) et réciproquement. Les identités suivantes sont utiles pour simplifier les circuits et comprendre les algorithmes :

$$HXH = Z, \quad HYH = -Y, \quad HZH = X$$

Pour simplifier la notation des algorithmes quantiques, on utilise généralement un schéma sous forme de circuit. Dans un tel circuit, les qubits sont représentés par des lignes horizontales, et les opérateurs sont placés sur ces lignes comme sur une portée musicale, de gauche à droite. Ainsi, le circuit de la figure 2.1 porte sur deux qubits, et représente l'application de l'opérateur A sur le qubit 1, puis de l'opérateur B sur le qubit 2 et enfin de l'opérateur C à nouveau sur le qubit 1. Ce circuit est donc équivalent à l'application de l'opérateur $U = (A \otimes I)(I \otimes B)(C \otimes I)$ sur le système $|\psi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2$ formé par les deux qubits.

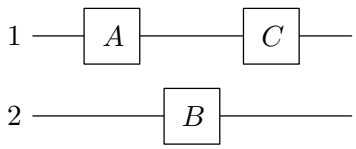


FIG. 2.1 – Exemple de circuit quantique

Dans cette notation, les opérateurs précédemment introduits sont symbolisés par les portes suivantes :

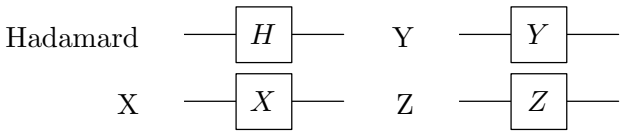


FIG. 2.2 – Noms et symboles des principales portes quantiques sur un qubit

Lorsqu'on prend l'exponentielle des matrices de Pauli, on obtient les opérateurs de rotation autour des axes x, y et z définis sur la figure 2.3

$$R_x(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}X} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) X = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$R_y(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}Y} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) Y = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$R_z(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}Z} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) Z = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}$$

On peut généraliser ces égalités en définissant l'opérateur rotation d'axe $\hat{n}$ et d'angle θ par

$$R_{\hat{n}}(\theta) = \exp(-i\theta\, \hat{n} \cdot \vec{\sigma}/2) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) (n_x X + n_y Y + n_z Z)$$

où $\vec{\sigma} = (X, Y, Z)$ et $\hat{n} = (n_z, n_y, n_z)$ est un vecteur réel de norme 1.

La raison d'une telle définition est plus évidente si on utilise la représentation de Bloch. Puisque l'état d'un qubit quelconque est décrit par la fonction d'onde $|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle$ avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, et que la phase globale de $|\psi\rangle$ n'a pas d'effet observable, on peut le paramétrer par deux angles θ et φ :

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

On peut ainsi représenter l´état du système par un point (θ, φ) situé sur une sphère de rayon 1, appelée sphère de Bloch. Dans cette représentation, l'opérateur $R_{\hat{n}}(\gamma)$ effectue simplement une rotation d'un point sur la sphère de Bloch d'un angle γ autour de l'axe $\hat{n}$.

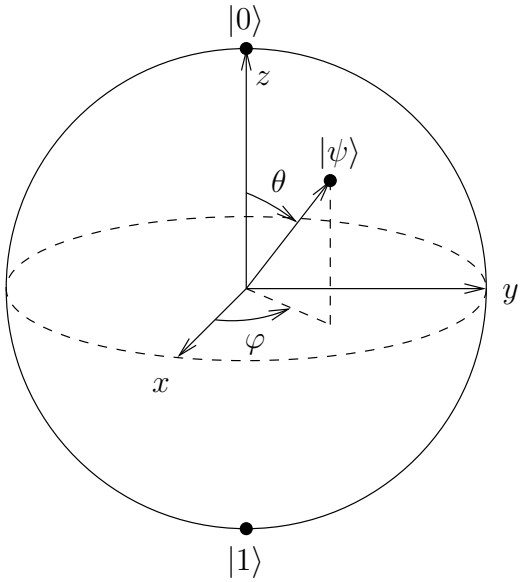


FIG. 2.3 – Sphère de Bloch

Si U est une opération unitaire sur un qubit, il existe α, β, γ et δ tels que

$$U = e^{i\alpha} R_z(\beta) R_y(\gamma) R_z(\delta) \tag{2.1}$$

En effet, U étant unitaire, ses colonnes et ses lignes sont orthonormales, et on peut les paramétrer comme suit

$$U = \begin{pmatrix} e^{i(\alpha-\beta/2-\delta/2)}\cos\frac{\gamma}{2} & -e^{i(\alpha-\beta/2+\delta/2)}\sin\frac{\gamma}{2} \\ e^{i(\alpha+\beta/2-\delta/2)}\sin\frac{\gamma}{2} & e^{i(\alpha+\beta/2+\delta/2)}\cos\frac{\gamma}{2} \end{pmatrix}$$

Plus généralement, U peut toujours s'écrire sous la forme

$$U = e^{i\alpha} R_{\hat{n}}(\theta)$$

2.1.2 Opérations élémentaires et universalité

Pour pouvoir construire n'importe quel opérateur, il faut ajouter aux opérations sur un qubit une porte qui agit sur au moins deux qubits simultanément. La porte la plus pratique est le NON contrôlé (controlled-NOT, ou CNOT), qui agit sur deux qubits : l'un est le qubit de contrôle, l'autre la cible. Si le contrôle est dans l´état $|0\rangle$ on ne fait rien, et s'il est dans l'état $|1\rangle$ le qubit cible est inversé (on applique l'opérateur X). Dans la base naturelle $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ (avec l'ordre $|\text{contrôle}\rangle \otimes |\text{cible}\rangle$), l'action de la porte CNOT est décrite par la matrice

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

Si l'on se restreint aux seuls états de la base, le CNOT est l'équivalent de la porte OU exclusif en logique booléenne, avec une recopie d'une des deux entrées pour assurer la réversibilité.

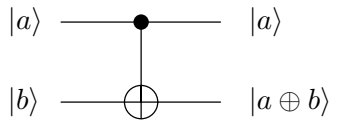


Fig. 2.4 – Symbole pour la porte controlled-NOT (CNOT). $\oplus$ désigne l'addition binaire modulo 2.

Avec la porte CNOT et toutes les opérations sur un qubit, on dispose à présent d'un ensemble universel, c'est-à-dire que tout opérateur unitaire sur n qubits peut être implémenté exactement en composant seulement des opérations sur un qubit et des portes CNOT [30]. Il est important de noter que cette construction n'est pas forcément efficace et peut demander un nombre de portes extrêmement grand. Cependant, il existe une infinité d'opérations possibles sur un qubit ; outre la difficulté de la réalisation physique d'un tel ensemble continu d'opérations, ceci rend la correction des erreurs impossible. Il est donc préférable de disposer d'un ensemble discret de

portes, même si l'on doit pour cela se résoudre à ne construire qu'approximativement les opérations sur plusieurs qubits. Le théorème de Solovay-Kitaev [58] indique que toute opération unitaire sur un qubit peut être approximée efficacement avec une précision arbitraire à l'aide des seules portes d'Hadamard et $\frac{\pi}{8}$.

$$\text{porte } \frac{\pi}{8} : \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} = e^{i\frac{\pi}{8}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\pi}{8}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\pi}{8}} \end{pmatrix} = e^{i\frac{\pi}{8}} R_z\left(\frac{\pi}{4}\right)$$

On peut donc approximer à la précision voulue n'importe quel opérateur unitaire sur n qubits grâce à l'ensemble universel formé par les portes élémentaires d'Hadamard, $\frac{\pi}{8}$ et CNOT. Il est intéressant de noter que la porte $\frac{\pi}{8}$ est absolument nécessaire pour espérer tirer parti de la puissance du calcul quantique. En effet, le théorème de Gottesman-Knill [45] stipule qu'un ordinateur classique peut simuler efficacement un ordinateur quantique qui disposerait des seules portes CNOT et Hadamard. Un algorithme quantique efficace utilisant uniquement ces deux portes conduirait donc automatiquement à un algorithme classique également efficace.

Cet ensemble universel discret n'est pas unique. Par exemple, la porte de Toffoli, la porte d'Hadamard et la porte de phase forment aussi un ensemble universel. La porte de Toffoli est un NOT doublement contrôlé (fig. 2.5), c'est-à-dire que l'on effectue l'opérateur X sur le qubit cible si et seulement si les deux qubits de contrôle sont tous les deux égaux à $|1\rangle$.

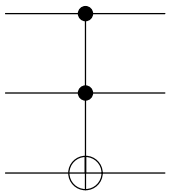


FIG. 2.5 – Porte de Toffoli

Quant à la porte de phase, c'est l'opération $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$.

2.1.3 Opérations contrôlées

Pour composer les algorithmes quantiques, il est pratique de disposer de portes un peu plus évoluées. Cette section est dédiée à la construction explicite des portes les plus courantes à l'aide des portes élémentaires précédentes. Ces portes seront nécessaires pour les algorithmes quantiques présentés dans cette thèse.

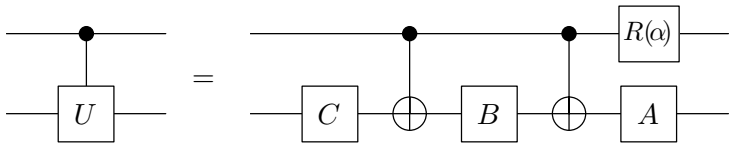


FIG. 2.6 – Construction d'un opérateur contrôlé quelconque

Armé de la porte CNOT et de toutes les opérations sur un qubit, on va construire n'importe quelle opération contrôlée sur un qubit, c'est-à-dire l'équivalent de la porte CNOT avec une opération quelconque U à la place de X sur le qubit cible. On peut pour cela partir de la décomposition (2.1) de U

$$U = e^{i\alpha} R_z(\beta) R_y(\gamma) R_z(\delta)$$

On définit alors les opérateurs

$$A = R_z(\beta)\, R_y\left(\frac{\gamma}{2}\right)$$

$$B = R_y\left(-\frac{\gamma}{2}\right) R_z\left(-\frac{\delta+\beta}{2}\right)$$

$$C = R_z\left(\frac{\delta-\beta}{2}\right)$$

On a alors

$$ABC = R_z(\beta) R_y\left(\frac{\gamma}{2}\right) R_y\left(-\frac{\gamma}{2}\right) R_z\left(-\frac{\delta+\beta}{2}\right) R_z\left(\frac{\delta-\beta}{2}\right) = I$$

D'autre part

$$\begin{aligned} AXBXC &= R_z(\beta) R_y\left(\frac{\gamma}{2}\right) X R_y\left(-\frac{\gamma}{2}\right) R_z\left(-\frac{\delta+\beta}{2}\right) X R_z\left(\frac{\delta-\beta}{2}\right) \\ &= R_z(\beta) R_y\left(\frac{\gamma}{2}\right) R_y\left(\frac{\gamma}{2}\right) R_z\left(\frac{\delta+\beta}{2}\right) R_z\left(\frac{\delta-\beta}{2}\right) \\ &= R_z(\beta) R_y(\gamma) R_z(\delta) \end{aligned}$$

On a ainsi $ABC = I$ et $e^{i\alpha} AXBXC = U$. Il suffit donc d'appliquer les opérateurs A, B et C sur le qubit cible en intercalant des portes CNOT dépendantes du qubit de contrôle, comme sur la figure 2.6. La porte $R(\alpha)$ multiplie le qubit de contrôle par $e^{i\alpha}$ si celui-ci est à $|1\rangle$, et ne fait rien sinon. Ceci équivaut à appliquer la porte à deux qubits

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\alpha} \end{pmatrix}$$

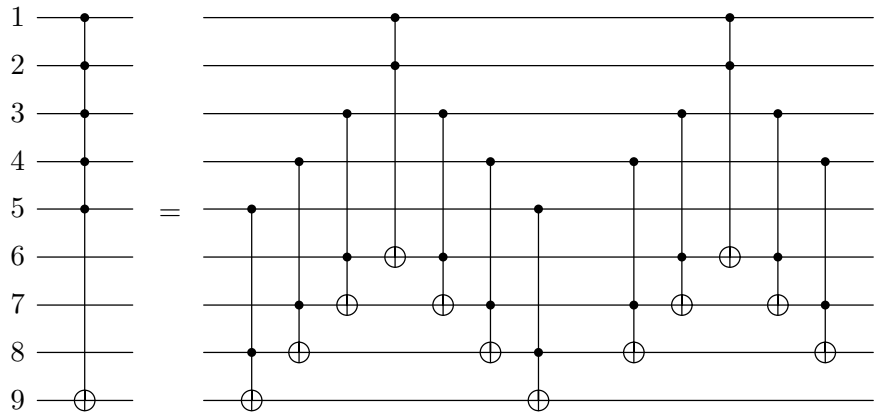


FIG. 2.7 – Construction d'un CNOT multi-contrôlé (illustré pour $n = 9$ et $m = 5$)

Un autre type de porte récurrent dans la plupart des algorithmes quantiques est l'opération contrôlée par plusieurs qubits simultanément, une généralisation de la porte précédente. On note $\bigwedge_n(U)$ l'opérateur U contrôlé par n qubits, c'est-à-dire qu'on applique U sur le qubit cible si et seulement si les n qubits de contrôle sont tous égaux à $|1\rangle$. Pour construire cette porte, on peut commencer par construire un CNOT multi-contrôlé [9].

Si $n \geq 5$ et $m \in 3, \ldots, [n/2]$, alors on peut construire la porte $\bigwedge_m(X)$ grâce au circuit de la figure 2.7, qui contient $4(m-2)$ portes de Toffoli. Dans ce circuit, considérons le premier groupe de portes. Le qubit 6 est inversé

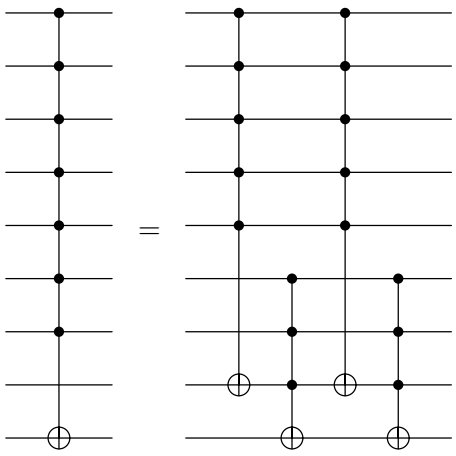


FIG. 2.8 – Construction d'un CNOT multi-contrôlé (illustré pour $n = 9$)

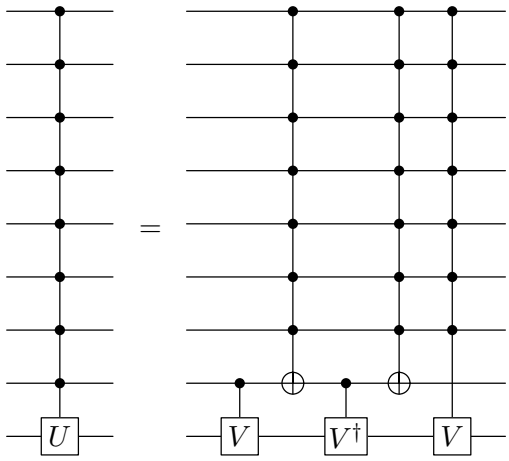


FIG. 2.9 – Construction d'une opération multi-contrôlée sur un qubit (illustré pour $n = 9$)

si et seulement si les qubits 1 et 2 sont à 1. Le qubit 7 est inversé si les 3 premiers qubits sont tous à 1, et ainsi de suite. Après le premier groupe de portes, le qubit 9 est donc inversé si et seulement si les 5 premiers qubits sont à 1, mais les qubits 6, 7 et 8 sont altérés. Pour leur rendre leurs valeurs initiales, on applique donc le second groupe de portes.

En combinant 4 portes $\bigwedge_m(X)$, on peut construire une porte $\bigwedge_{n-2}(X)$ sur n qubits grâce au circuit de la figure 2.8, ce qui fait un total de $8(n-5)$ portes de Toffoli. La construction d'une porte CNOT multi-contrôlée re-

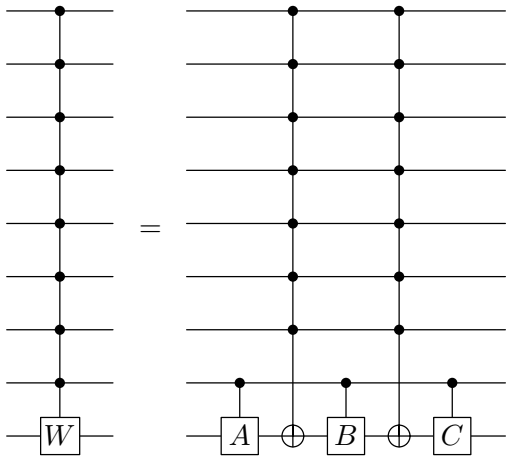


FIG. 2.10 – Construction d'une opération SU(2) multi-contrôlée sur un qubit

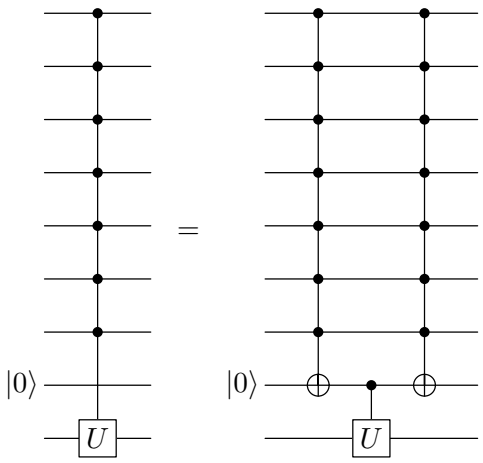


FIG. 2.11 – Construction d'une opération multi-contrôlée sur un qubit avec un qubit auxiliaire

quiert donc un nombre de portes élémentaires qui augmente linéairement avec le nombre de qubits, pourvu que l'on dispose d'un qubit auxiliaire. On peut noter également que ce qubit auxiliaire est inchangé par la porte, donc même un qubit utilisé par ailleurs peut faire l'affaire.

Grâce à la porte $\bigwedge_{n-2}(X)$, on peut maintenant construire une opération U quelconque sur un qubit contrôlée par plusieurs qubits grâce au circuit de la figure 2.9, avec V tel que $V^2 = U$. Par récurrence, la construction d'une porte $\bigwedge_{n-1}(U)$ requiert donc $O(n^2)$ portes élémentaires.

Cependant, dans quelques cas particuliers, la simulation de la porte $\bigwedge_{n-1}(U)$ peut être linéaire en n. C'est le cas par exemple si $U \in SU(2)$, avec le circuit de la figure 2.10 (cette construction est similaire à celle de la figure 2.6, avec $\alpha = 0$, ce qui correspond bien à un opérateur de $SU(2)$).

Si l'on s'octroie un qubit auxiliaire, on peut également simuler une porte $\bigwedge_{n-1}(U)$ de façon linéaire, avec un U quelconque (fig. 2.11). Mais contrairement au cas du circuit 2.8, le qubit auxiliaire doit rester dans l'état $|0\rangle$; il n'est donc pas possible de le réutiliser ailleurs.

2.2 Transformée de Fourier quantique

2.2.1 Algorithme de la Transformée de Fourier

À l'aide des portes définies précédemment, on est à présent en mesure de construire des algorithmes quantiques évolués. Honneur à la transformée de

Fourier quantique, qui est utilisée dans de nombreux algorithmes, dont ceux de cette thèse. La transformée de Fourier discrète d'un vecteur complexe x_0, ..., x_{N-1} est définie par

$$\tilde{x}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j e^{2\pi i \frac{jk}{N}}$$

De la même manière, on définit la transformée de Fourier quantique (TFQ) [28, 83] par son action sur les vecteurs de la base orthonormale $|0\rangle$, ..., $|N-1\rangle$

$$|j\rangle \overset{TFQ}{\longmapsto} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i \frac{jk}{N}} |k\rangle$$

L´équivalence avec la transformée de Fourier discrète est visible lorsqu'on applique la transformée de Fourier quantique à une superposition d'états

$$\sum_{j=0}^{N-1} x_j |j\rangle \longmapsto \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{x}_k |k\rangle$$

Même si l'unitarité d'une telle transformation n'est pas évidente au premier abord, on peut la décomposer en une série de transformations unitaires élémentaires. On suppose dans la suite que $N = 2^n$; cette hypothèse n'est à vrai dire pas très restrictive car elle est généralement faite aussi dans le cas de la transformée de Fourier discrète (l'algorithme de la transformée de Fourier rapide ne marche que pour N de la forme a^b). Le calcul s'effectue donc sur les vecteurs de base $|0\rangle$, ..., $|2^n - 1\rangle$, et on note $j_1 j_2 \ldots j_n$ la représentation binaire de j (ou $j = j_1 2^{n-1} + \ldots + j_n 2^0$), et $0.j_l j_{l+1} \ldots j_m$ la fraction binaire $j_l/2 + j_{l+1}/4 + \ldots + j_m/2^{m-l+1}$.

On peut alors factoriser la transformation de Fourier quantique ainsi

$$\begin{aligned}
|j\rangle \quad &\longmapsto \quad \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi i jk/2^n} |k\rangle \\
&= \quad \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k_1=0}^{1} \cdots \sum_{k_n=0}^{1} e^{2\pi i j \left(\sum_{l=1}^{n} k_l 2^{-l}\right)} |k_1 \ldots k_n\rangle \\
&= \quad \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k_1=0}^{1} \cdots \sum_{k_n=0}^{1} \bigotimes_{l=1}^{n} e^{2\pi i j k_l 2^{-l}} |k_l\rangle \\
&= \quad \frac{1}{2^{n/2}} \bigotimes_{l=1}^{n} \left[\sum_{k_l=0}^{1} e^{2\pi i j k_l 2^{-l}} |k_l\rangle \right] \\
&= \quad \frac{1}{2^{n/2}} \bigotimes_{l=1}^{n} \left(|0\rangle + e^{2\pi i j 2^{-l}} |1\rangle \right)
\end{aligned}$$

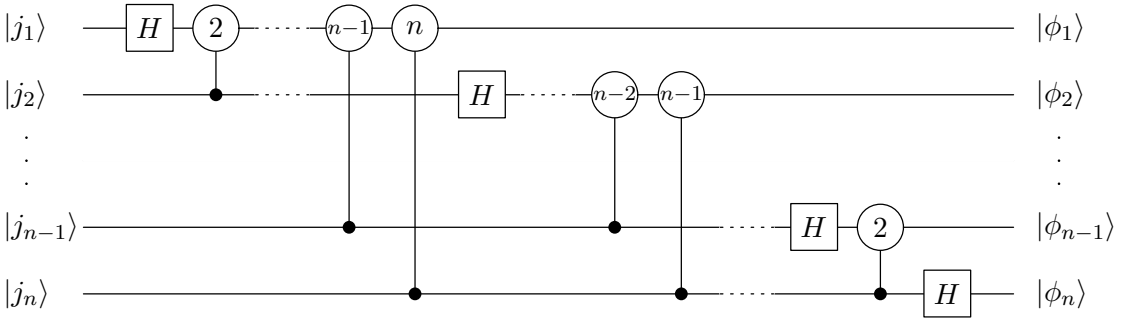
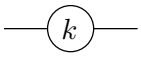


FIG. 2.12 – Circuit de la transformée de Fourier quantique

$$= \frac{1}{2^{n/2}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_n}|1\rangle\right) \otimes \left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_{n-1}j_n}|1\rangle\right) \dots \left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_1 j_2 \dots j_n}|1\rangle\right) \tag{2.2}$$

Cette décomposition permet de concevoir aisément un circuit pour la transformée de Fourier quantique, comme celui de la figure 2.12, où



représente l'opération $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi i/2^k} \end{pmatrix}$

Pour comprendre le fonctionnement de ce circuit, suivons son action sur $|j\rangle = |j_1 \dots j_n\rangle$. La première porte de Hadamard donne

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_1}|1\rangle\right)|j_2 \dots j_n\rangle$$

Puis, la première rotation contrôlée ajoute un bit de phase supplémentaire suivant l'état de $|j_2\rangle$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_1 j_2}|1\rangle\right)|j_2 \dots j_n\rangle$$

Et ainsi de suite jusqu'à la rotation n

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_1 j_2 \dots j_n}|1\rangle\right)|j_2 \dots j_n\rangle$$

De même, la deuxième série de porte de Hadamard et de rotations contrôlées conduisent à l'état

$$\frac{1}{2}\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_1 j_2 \dots j_n}|1\rangle\right)\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_2 \dots j_n}|1\rangle\right)|j_3 \dots j_n\rangle$$

À la fin du circuit, nous obtenons donc l'état

$$\begin{aligned} &|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{n-1}\rangle \otimes |\phi_n\rangle \\ &= \frac{1}{2^{n/2}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_1 j_2 \dots j_n}|1\rangle\right)\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_2 \dots j_n}|1\rangle\right) \dots \left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.j_n}|1\rangle\right) \end{aligned}$$

Ceci n'est rien d'autre que la transformée de Fourier quantique de $|j\rangle$ (2.2) où l'ordre des qubits a été inversé (la transformée exacte serait $|\phi_n\rangle \otimes |\phi_{n-1}\rangle \otimes \cdots \otimes |\phi_2\rangle \otimes |\phi_1\rangle$). On peut remettre les qubits dans le bon ordre en appliquant $n/2$ portes d'échange, comme celle de la figure 2.13. Cependant, on peut faire l'économie de cette étape en redéfinissant simplement les rôles des qubits, et en inversant donc systématiquement toutes les portes à venir. Cela peut être fait automatiquement par l'ordinateur classique qui pilote l'évolution de l'ordinateur quantique.

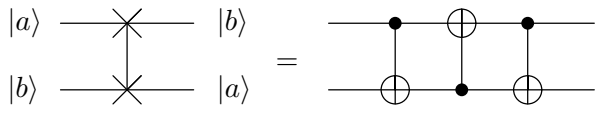


FIG. 2.13 – Circuit de la porte d'échange

Ce circuit contient $n(n+1)/2$ portes quantiques, et est donc un moyen efficace de calculer la transformée de Fourier discrète d'un vecteur. En comparaison, l'algorithme classique de transformée de Fourier rapide demande $O(n2^n)$ opérations, ce qui est exponentiellement plus lent. Cependant, on ne peut pas utiliser cet algorithme pour calculer naïvement la transformée de Fourier discrète d'une série de données. Si le calcul est en effet exponentiellement plus efficace, l'extraction du résultat complet de la mémoire quantique demanderait elle un nombre exponentiel de mesures. La transformée de Fourier quantique n'est pas un algorithme en elle-même, elle doit être incluse dans un algorithme quantique à même d'utiliser simultanément toutes les composantes du résultat, comme dans l'estimation de phase, l'algorithme de factorisation de Shor ou les algorithmes construits dans cette thèse.

2.2.2 Estimation de phase

Comme dit ci-dessus, la transformée de Fourier quantique est très puissante, mais ce n'est pas vraiment un algorithme en soi. Elle est en général utilisée au sein d'autres algorithmes qui tirent parti de ses spécificités. Le plus célèbre est sans doute l'estimation de phase [57]. Supposons qu'un opérateur unitaire U, que l'on sait construire efficacement, a un vecteur propre $|u\rangle$ avec la valeur propre $e^{i2\pi\varphi}$. Le but de cet algorithme est d'estimer la valeur de φ. Pour cela, on fait deux hypothèses :

- on est capable de construire au préalable le vecteur propre $|u\rangle$ dont on veut déterminer la valeur propre, ou tout du moins un état initial qui a une projection importante sur $|u\rangle$
- on peut effectuer l'opération U^{2^j} pour tout $j \geq 0$, et ce en un temps qui n'augmente pas exponentiellement avec j

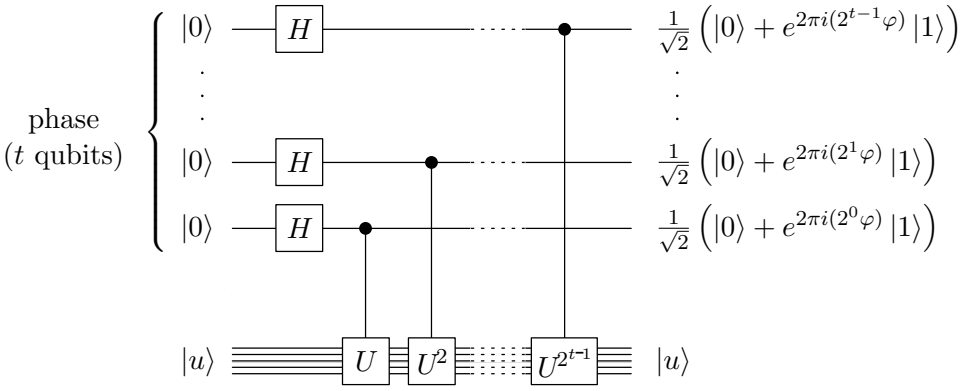


FIG. 2.14 – Circuit quantique pour l'estimation de phase

La seconde hypothèse est très contraignante, puisque même si l'on sait appliquer U de manière efficace, rien ne garantit qu'il en soit de même pour U^{2^j}. Par exemple la méthode qui consisterait à itérer 2^j fois l'opérateur U demande un nombre d'opérations qui croît exponentiellement avec j. L'algorithme d'estimation de phase n'est donc utile que dans les cas particuliers où cette construction efficace est possible.

Deux registres vont être utilisés : un premier registre de t qubits initialement mis à $|0\rangle$, qui va accueillir l'estimation de φ à la fin du calcul, et un deuxième registre qui contient le vecteur propre $|u\rangle$. L'algorithme se décompose en deux phases. On applique en premier lieu le circuit de la figure 2.14. La série de transformations d'Hadamard permettent d'obtenir l'état

$$\frac{1}{2^{t/2}}\left(|0\rangle + |1\rangle\right)\left(|0\rangle + |1\rangle\right)\ldots\left(|0\rangle + |1\rangle\right) \otimes |u\rangle$$

Puis l'application d'une suite de puissances de l'opérateur U sur le second registre contrôlée par le premier registre conduit à l'état

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2^{t/2}}\left(|0\rangle + U^{2^{t-1}}|1\rangle\right)\left(|0\rangle + U^{2^{t-2}}|1\rangle\right)\ldots\left(|0\rangle + U^{2^0}|1\rangle\right) \otimes |u\rangle & \\
&= \frac{1}{2^{t/2}}\sum_{k=0}^{2^t-1} |k\rangle \otimes U^k |u\rangle \\
&= \left(\frac{1}{2^{t/2}}\sum_{k=0}^{2^t-1} e^{2\pi i k\varphi}|k\rangle\right) \otimes |u\rangle
\end{aligned}$$

La deuxième phase de l'algorithme consiste à appliquer une transformée de Fourier quantique inverse sur le premier registre (celle-ci est obtenue en inversant l'ordre des portes du circuit 2.12). Puis on termine en mesurant simplement le premier registre dans la base naturelle.

En effet, l'état du premier registre obtenu à la fin de la première phase est de la forme $\frac{1}{2^{t/2}}\sum_{k=0}^{2^t-1} f(k)\,|k\rangle$ avec $f(k) = e^{2\pi i k\varphi}$. Une transformée de Fourier inverse continue de f donnerait

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-2\pi i x\nu}\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i x(\nu-\varphi)}\mathrm{d}x = \delta(\nu-\varphi)$$

On voit donc intuitivement que la transformée de Fourier quantique inverse (discrète) va conduire à un état dont la mesure donne une valeur proche de φ avec une forte probabilité. Quantitativement, appelons b l'entier compris entre 0 et $2^t - 1$ tel que $b/2^t$ soit la meilleure approximation de φ inférieure à φ. Supposons que le résultat de la mesure finale du premier registre est m, et soit e un entier positif. La probabilité pour que m soit proche de b à e près peut être majorée (voir par exemple [71])

$$p(|m-b| > e) \leq \frac{1}{2(e-1)} \tag{2.3}$$

Supposons qu'on désire une approximation de φ exacte à n bits ($n \leq t$), c'est-à-dire avec une précision de 2^{-n}. On choisit donc $e = 2^{t-n} - 1$, et d'après (2.3), la probabilité d'obtenir une approximation de φ avec cette précision est d'au moins $1 - 1/2(2^{t-n} - 2)$. Pour avoir une précision de n bits sur φ avec une probabilité d'au moins $1 - \varepsilon$, il faut ainsi prendre

$$t = n + \left\lceil \log_2\left(2 + \frac{1}{2\varepsilon}\right)\right\rceil$$

où $\lceil\ \rceil$ désigne l'arrondi à l'entier supérieur.

Une application spectaculaire de l'estimation de phase est l'algorithme de Shor [83, 85]. En effet, la factorisation d'un entier N peut être réduite au problème de trouver la période de la fonction $f(x) = a^x \bmod N$, où $a < N$ est choisi aléatoirement et n'a pas de facteur commun avec N. Ceci peut être fait en appliquant l'algorithme d'estimation de phase à l'opérateur U tel que

$$U\,|y\rangle = |ay \bmod N\rangle$$

Cela est possible car les puissances de U sont constructibles de manière efficace, et car le vecteur propre auquel on applique l'algorithme ne dépend pas de a ni de N.

2.3 Recherche quantique

2.3.1 Algorithme de Grover

Un autre algorithme illustre est celui de Grover [47, 48]. Supposons que l'on dispose d'une liste de N éléments, et que l'on veuille en trouver un

qui réponde à certains critères. Si la liste ne possède pas de structure particulière (par exemple si les éléments y sont rangés aléatoirement), alors aucun algorithme classique ne peut faire mieux que de regarder les éléments un par un jusqu'à trouver le bon. Cette méthode de recherche rudimentaire mais néanmoins optimale requiert en moyenne $N/2$ opérations, soit $O(N)$. Remarquablement, il existe un algorithme de recherche *quantique* (appelé algorithme de Grover) qui permet d'effectuer la même recherche en $O(\sqrt{N})$ opérations.

Pour formuler ce problème plus précisément, on introduit une fonction $f(x)$ qui vaut 1 si x est l'un des éléments recherchés et 0 sinon. On suppose de plus que $N = 2^n$ et qu'il y a exactement M éléments qui correspondent aux critères de la recherche, avec $0 \leq M \ll N$. Classiquement, la recherche se réduit alors à trouver l'un des M éléments x qui vérifient $f(x) = 1$.

Afin de pouvoir formuler les deux algorithmes de la même manière, on suppose qu'on dispose également d'un *oracle* quantique O : on soumet à cette boîte noire un état $|x\rangle$ accompagné d'un qubit auxiliaire $|a\rangle$, et celle-ci nous révèle par l'intermédiaire du qubit auxiliaire si $|x\rangle$ fait parti des éléments recherchés ou non. Plus précisément, l'oracle O effectue l'opération quantique

$$|x\rangle\,|a\rangle \longrightarrow |x\rangle\,|a \oplus f(x)\rangle$$

Si l'on applique l'oracle à l'état $|x\rangle|0\rangle$, il suffit de mesurer ensuite le qubit auxiliaire pour déterminer si x est une des solutions recherchées, auquel cas le résultat de la mesure sera 1. Dans le cas de l'algorithme de Grover, il est cependant plus astucieux d'appliquer l'oracle avec un qubit auxiliaire dans l'état $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. On effectue ainsi la transformation

$$|x\rangle \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \longrightarrow (-1)^{f(x)}\,|x\rangle \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right)$$

Comme le qubit auxiliaire n'est pas modifié, on l'omettra par la suite :

$$|x\rangle \longrightarrow (-1)^{f(x)}\,|x\rangle$$

On ne se préoccupe pas pour l'instant de savoir comment est constitué l'oracle, on se contente juste de supposer qu'il est possible de le construire efficacement. Cependant, on suppose également que l'appel à l'oracle est le facteur limitant de l'algorithme, l'étape qui coûte le plus. Grâce à cette hypothèse, l'efficacité de l'algorithme sera évaluée simplement comme le nombre d'appels nécessaires à l'oracle. On peut remarquer que cela était déjà le cas classiquement, puisqu'on a considéré la vérification d'un élément comme une opération élémentaire.

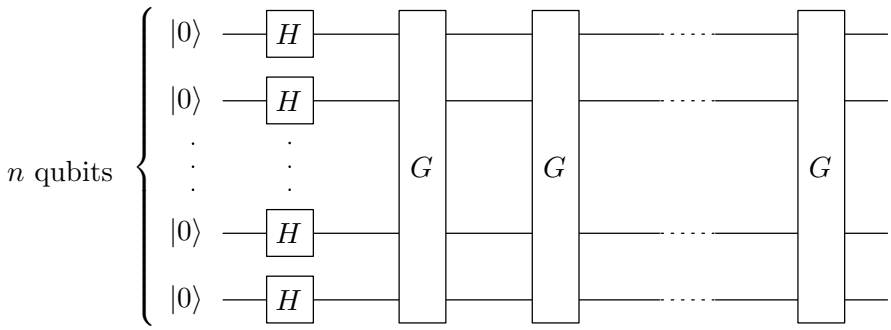


FIG. 2.15 – Circuit quantique pour l'algorithme de Grover

L'algorithme proprement dit est représenté sur la figure 2.15. On commence par construire une superposition uniforme $|\psi\rangle$ de tous les états grâce à la transformation $H^{\otimes n}$ appliquée à $|0\ldots0\rangle$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle$$

Grâce à l'application répétée de l'opérateur de Grover G, l'amplitude de probabilité des états recherchés est ensuite augmentée progressivement, pendant que celle des autres est diminuée. Si l'on mesure le registre quantique à la fin de cet algorithme, on trouvera ainsi avec une forte probabilité l'une des solutions à notre problème de recherche.

L'opérateur de Grover se décompose en 4 étapes :

1. application de l'oracle O
2. transformation d'Hadamard $H^{\otimes n}$
3. application d'une phase de -1 sur tous les états de l'ordinateur sauf $|0\rangle$, soit l'opération $P = 2\,|0\rangle\,\langle 0| - I$
4. transformation d'Hadamard $H^{\otimes n}$

L'effet combiné des 3 dernières étapes peut se résumer dans l'opération

$$H^{\otimes n}(2\,|0\rangle\,\langle 0| - I)H^{\otimes n} = 2\,|\psi\rangle\,\langle\psi| - I$$

Une itération de Grover peut donc s'écrire

$$G = (2\,|\psi\rangle\,\langle\psi| - I)\,O$$

Le mécanisme de cet algorithme s'explique élégamment à l'aide d'une représentation géométrique. Appelons S l'ensemble des éléments x qui satisfont aux critères de la recherche, et $\bar{S}$ son complémentaire. On définit les

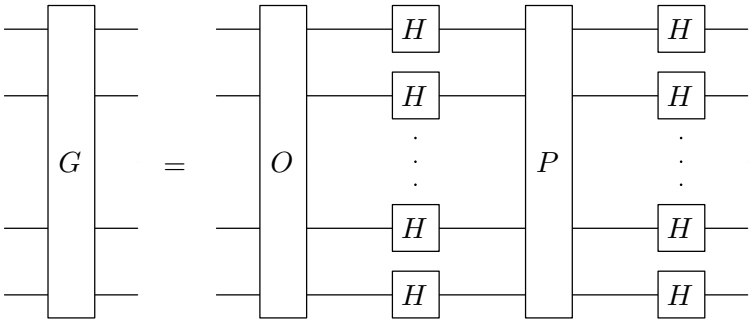


FIG. 2.16 – Circuit quantique pour une itération de Grover

états $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N-M}} \sum_{x \in \bar{S}} |x\rangle \\ |\beta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{x \in S} |x\rangle \end{aligned}$$

Dans le plan $(|\alpha\rangle, |\beta\rangle)$, l'itération de Grover prend une forme très simple. En effet, l'état initial du calcul $|\psi\rangle$ peut être réexprimé en fonction de ces vecteurs

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sqrt{\frac{N-M}{N}} |\alpha\rangle + \sqrt{\frac{M}{N}} |\beta\rangle \\ &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\alpha\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\beta\rangle \end{aligned}$$

De plus, l'oracle O multiplie tous les états de S par -1 et laisse ceux de $\bar{S}$ invariants. Il s'agit donc tout simplement d'une réflexion par rapport au vecteur $|\alpha\rangle$ dans le plan $(|\alpha\rangle, |\beta\rangle)$. De même, $2|\psi\rangle\langle\psi| - I$ est une réflexion par rapport au vecteur $|\psi\rangle$. L'action de G, qui est la composée de deux réflexions, est donc finalement une rotation dans le plan $(|\alpha\rangle, |\beta\rangle)$, d'un angle égal à θ (le double de l'angle entre $|\alpha\rangle$ et $|\psi\rangle$). Toutes ces opérations sont représentées sur la figure 2.17, en partant d'un état quelconque $|\varphi\rangle$.

L'état obtenu après k applications de l'itération de Grover G est donc la rotation de $|\psi\rangle$ d'un angle $k\theta$ dans le plan $(|\alpha\rangle, |\beta\rangle)$

$$G^k |\psi\rangle = \cos\left(\frac{2k+1}{2}\theta\right) |\alpha\rangle + \sin\left(\frac{2k+1}{2}\theta\right) |\beta\rangle$$

L'objectif de l'algorithme étant d'augmenter l'amplitude de probabilité des états $|x\rangle$ tels que $x \in S$, on cherche en fait à se rapprocher le plus possible du vecteur $|\beta\rangle$. Quel est le nombre r d'itérations nécessaires pour atteindre

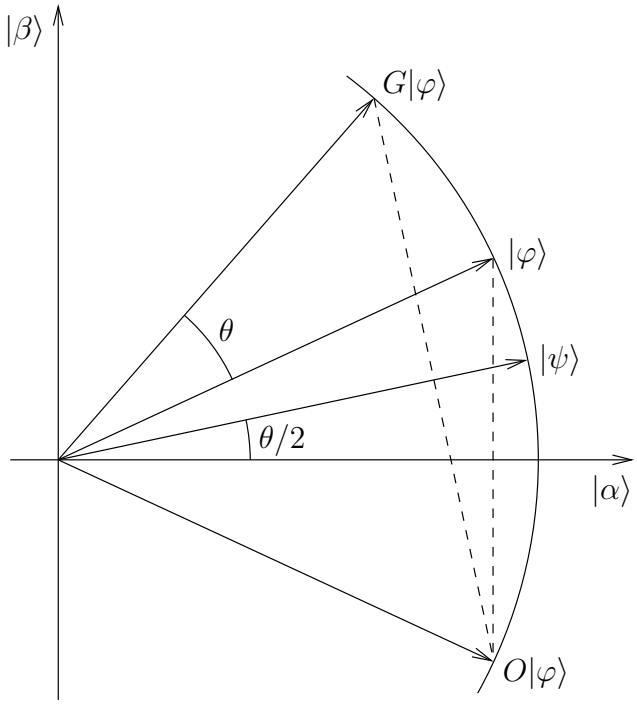


FIG. 2.17 – Interprétation géométrique de l'algorithme de Grover

ce but ? On veut $G^r\,|\psi\rangle \approx |\beta\rangle$, donc on doit choisir r tel que $\left(r+\frac{1}{2}\right)\theta$ soit le plus proche possible de $\frac{\pi}{2}$, soit

$$r = \left[\frac{\pi}{2\theta} - \frac{1}{2}\right] = \left\lfloor \frac{\pi}{2\theta} \right\rfloor$$

où $[\,]$ représente l'entier le plus proche, et $\lfloor\,\rfloor$ le plus grand entier inférieur ou égal. Comme

$$\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \sqrt{\frac{M}{N}} \leq \frac{\theta}{2}$$

On obtient une borne supérieure pour l'efficacité de l'algorithme

$$r \leq \frac{\pi}{4}\sqrt{\frac{N}{M}} = O(\sqrt{N})$$

Par ailleurs, il a été démontré que cette efficacité en $O(\sqrt{N})$ était optimale [13, 16]. C'est-à-dire que tout algorithme quantique qui consiste en une succession d'opérations unitaires et d'appels à l'oracle nécessite au moins $O(\sqrt{N})$ appels pour réussir avec une forte probabilité. Bien que le gain ne soit pas aussi important que dans le cas de l'algorithme de Shor, l'intérêt de cet algorithme n'en est pas moindre puisqu'il est très versatile. En effet, un

grand nombre de problèmes mathématiques peuvent être formulés comme la recherche d'une solution devant satisfaire les critères d'un oracle. Cela inclut notamment tous les problèmes NP, qui peuvent être durs à résoudre, mais dont on peut vérifier les solutions facilement. Pour cette classe de problèmes, l'algorithme de Grover permet d'obtenir un gain de vitesse quadratique de manière systématique. Cependant, comme le gain n'est pas exponentiel mais seulement polynomial, cela ne suffit pas à changer la classe de complexité de ces problèmes. Il faut noter enfin que le gain quadratique de Grover est prouvé, ce qui n'est pas le cas du gain exponentiel de Shor, puisqu'il peut éventuellement exister un algorithme classique efficace de factorisation encore non découvert.

2.3.2 Amplification d'amplitude

L'algorithme de Grover peut être généralisé sous une forme intéressante [17, 18]. Cette extension est utilisée dans la deuxième publication de cette thèse. Supposons que l'espace de Hilbert de l'ordinateur se décompose comme la somme directe de deux sous-espaces H_0 et H_1

$$H = H_0 \oplus H_1$$

À la fin d'un certain calcul représenté par l'opérateur unitaire A, l'ordinateur quantique se trouve dans un état $|\psi\rangle = A\,|0\rangle$. Si $|\psi_0\rangle$ et $|\psi_1\rangle$ sont respectivement les projections de $|\psi\rangle$ sur H_0 et H_1

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + |\psi_1\rangle$$

Or, pour une raison particulière seule la composante de $|\psi\rangle$ qui se trouve dans H_1 nous intéresse. Par exemple, dans le cas où la probabilité totale $a = \langle\psi_1\,|\,\psi_1\rangle$ de mesurer la fonction d'onde $|\psi\rangle$ dans un état de H_1 est faible, il est très inefficace de déterminer l'expression de $|\psi_1\rangle$ dans la base naturelle par une mesure directe. On va donc chercher à augmenter l'amplitude de $|\psi_1\rangle$ tout en diminuant celle de $|\psi_0\rangle$ afin d'obtenir un état qui soit entièrement compris dans H_1.

Pour cela, on utilise une version modifiée de l'algorithme de Grover. Le processus d'amplification est réalisé en appliquant itérativement à l'état $|\psi\rangle$ l'opérateur

$$Q = APA^{\dagger}O$$

De même que précédemment, P est un opérateur qui multiplie tous les états par -1 sauf $|0\rangle$, et O est un oracle qui applique une phase de -1 également à tous les états qui sont inclus dans H_1

$$|x\rangle \longrightarrow \begin{cases} -\,|x\rangle & \text{si } |x\rangle \in H_1 \\ \,|x\rangle & \text{si } |x\rangle \in H_0 \end{cases}$$

Q est donc la composition de la réflexion d'axe $|\psi\rangle\langle\psi|$

$$APA^\dagger = A(2\,|0\rangle\,\langle 0| - I)A^\dagger = 2\,|\psi\rangle\,\langle\psi| - I$$

et de la réflexion d'axe $|\psi_0\rangle\langle\psi_0|$

$$O = 2\,|\psi_0\rangle\,\langle\psi_0| - I$$

De manière analogue à l'itération de Grover, Q a pour effet de tourner le vecteur $|\psi\rangle$ dans le plan $(|\psi_0\rangle\,, |\psi_1\rangle)$ d'un angle θ défini par

$$\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \langle\psi\,|\,\psi_1\rangle = a$$

Après k itérations de Q sur $|\psi\rangle$, l'état obtenu est

$$Q^k\,|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{1-a}}\cos\left(\frac{2k+1}{2}\,\theta\right)|\psi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\left(\frac{2k+1}{2}\,\theta\right)|\psi_1\rangle \qquad (2.4)$$

Pour avoir l'amplitude de $|\psi_1\rangle$ la plus grande possible, on doit choisir un nombre d'itérations

$$r = \left\lfloor\frac{\pi}{2\theta}\right\rfloor \approx \frac{\pi}{4\sqrt{a}}$$

la dernière approximation étant valable si a est faible, ce qui est généralement le cas puisqu'on cherche précisément à l'amplifier.

Illustrons l'utilité de cet algorithme sur un exemple. Prenons un registre de 5 qubits dont les états de base représentent des positions variant de 0 à $2^5-1 = 31$. L'algorithme A appliqué à ce registre délivre une fonction d'onde $|\psi\rangle$, dont seule la partie qui est située près de l'origine est digne d'intérêt. On choisit donc arbitrairement d'amplifier la fonction d'onde entre les positions 0 et $2^2 - 1 = 3$. Ceci est réalisé en appliquant l'algorithme présenté ci-dessus, avec l'oracle O de la figure 2.18. Celui-ci ajoute une phase de -1 si les 3 qubits de poids fort sont tous à 0, ce qui correspond bien aux états $|x\rangle$ avec x entre 0 et 3. La construction de telles portes multi-contrôlées est détaillée dans la section (2.1.3).

Un aspect assez gênant de cet algorithme est qu'il nécessite la connaissance préalable de a pour fonctionner. Il est possible d'obtenir une estimation de a grâce une utilisation subtile de la transformée de Fourier quantique. Cependant, de tels raffinements ne sont la plupart du temps pas nécessaires. En effet, il s'agit généralement d'amplifier un petit sous-espace ($a \ll 1$) afin de pouvoir mesurer avec une bonne probabilité les amplitudes relatives des états qui y sont contenus. Pour cela, obtenir un état $|\varphi\rangle$ tel que $\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle \sim 1$ est suffisant. Si l'on regarde l'équation (2.4), on voit qu'en prenant un k

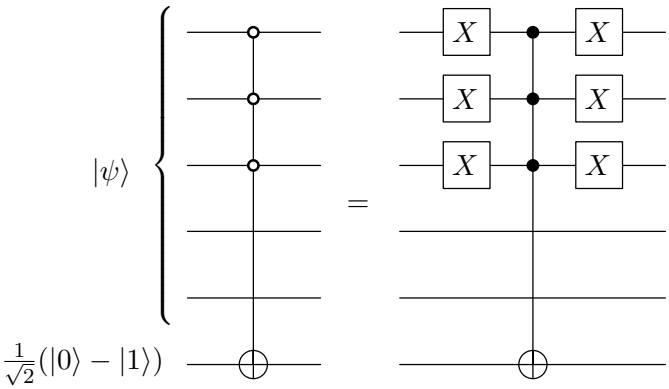


FIG. 2.18 – Exemple d'oracle pour l'algorithme d'amplification d'amplitude

au hasard, mais toutefois assez grand pour que $\frac{2k+1}{2}\theta \gg \pi$, alors on peut considérer que

$$Q^k |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{1-a}} \cos(\gamma) |\psi_0\rangle + \frac{1}{\sqrt{a}} \sin(\gamma) |\psi_1\rangle$$

avec γ un angle tiré de manière aléatoire et uniforme entre 0 et 2π. Dans ce cas, la probabilité de réussite de l'algorithme est de $\langle \sin^2(\gamma) \rangle = \frac{1}{2}$. Si le k choisi au hasard n'est pas assez grand, on peut atteindre de manière efficace le régime en question en doublant la valeur de k à chaque échec de l'algorithme.

2.4 Simulations de systèmes quantiques

Cette dernière partie est consacrée plus spécifiquement à la simulation des systèmes quantiques. Comme mentionné dans l'introduction, les ordinateurs quantiques seraient très utiles pour simuler l'évolution dynamique de systèmes quantiques. Par exemple dans le cas d'un problème quantique à N corps, la taille de l'espace de Hilbert augmente exponentiellement avec N mais le nombre de qubits nécessaire pour simuler ce système croît seulement comme N. L'idée originale remonte à Feynman, mais celui-ci n'avait proposé aucun exemple précis. Depuis, de nombreux algorithmes ont été conçus, notamment pour la simulation de systèmes quantiques à N corps [68, 1, 72] et la simulation de systèmes de spins [66, 87].

Prenons comme illustration une méthode générale pour simuler un système quantique à temps continu qui a été développée dans [95, 99]. Considérons le mouvement d'une particule quantique à une dimension. Il est régi par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = H\psi(x,t)$$

où le hamiltonien est donné par

$$H = H_0 + V(x) \quad \text{avec} \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

H_0 est la partie responsable de l'évolution libre du système, et $V(x)$ est un potentiel à une dimension. Supposons que l'on désire simuler l'évolution de $\psi(x,t)$ sur un ordinateur quantique de n qubits. Tout d'abord, si le système n'est pas naturellement quantifié, il faut procéder à une discrétisation de la variable continue x. Cela revient a borner l'espace accessible, et à découper celui-ci en 2^n intervalles, représentés chacun par un des 2^n états de l'espace de Hilbert de l'ordinateur. On supposera maintenant pour simplifier que le système est déjà quantifié (c'est le cas des modèles qui seront étudiés dans les chapitres suivants).

Pour intégrer l'équation de Schrödinger, on discrétise l'évolution en temps également. En effet, pour deux opérateurs A et B quelconques on peut décomposer l'opérateur d'évolution grâce à la formule de Trotter :

$$\lim_{n\to\infty}\left(e^{iAt/n}e^{iBt/n}\right)^n = e^{i(A+B)t}$$

Considérons un intervalle de temps ε ; l'état de la fonction d'onde à l'instant $t+\varepsilon$ est donné en fonction de celui au temps t par

$$\psi(x,t+\varepsilon) = e^{-\frac{i}{\hbar}[H_0+V(x)]\varepsilon}\psi(x,t)$$

Comme H_0 et $V(x)$ ne commutent pas, on doit utiliser un développement approché pour construire l'opérateur du membre de droite

$$e^{i(A+B)\Delta t} = e^{iA\Delta t}e^{iB\Delta t} + O(\Delta t^2)$$

On peut noter au passage qu'il existe aussi un autre développement à peine plus compliqué qui permet d'approximer $e^{i(A+B)\Delta t}$ à l'ordre 3 en Δt

$$e^{i(A+B)\Delta t} = e^{iA\Delta t/2}e^{iB\Delta t}e^{iA\Delta t/2} + O(\Delta t^3)$$

Si ε est suffisamment petit, on peut écrire

$$e^{-\frac{i}{\hbar}[H_0+V(x)]\varepsilon} \approx e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\varepsilon}e^{-\frac{i}{\hbar}V(x)\varepsilon} \tag{2.5}$$

Pour implémenter ces opérateurs, on utilise la transformée de Fourier quantique. Si F est l'opérateur de transformée de Fourier, la variable k conjuguée de x est telle que $-i\frac{\partial}{\partial x} = F^\dagger k F$. Comme $p = \hbar k$, le premier opérateur de 2.5 peut s'écrire

$$e^{-\frac{i}{\hbar}H_0\varepsilon} = F^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)\varepsilon}F$$

On peut ainsi simuler l'évolution du système de la façon suivante : on découpe la durée t de la simulation en s tranches ε ($t = s\varepsilon$). Pour obtenir la fonction d'onde $\psi(x,t)$, il suffit alors d'appliquer s fois l'opérateur

$$F^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)\varepsilon} F e^{-\frac{i}{\hbar}V(x)\varepsilon}$$

L'opérateur $e^{-\frac{i}{\hbar}V(x)\varepsilon}$ est diagonal dans la représentation x. Grâce à la transformée de Fourier F, on passe en représentation k, où l'opérateur d'évolution libre est à son tour diagonal. On termine le cycle en appliquant l'opérateur $F^\dagger = F^{-1}$ pour revenir en représentation x.

La principale difficulté est ainsi de construire une transformation unitaire diagonale du type

$$|x\rangle \longmapsto e^{if(x)}\,|x\rangle$$

où f est une fonction quelconque. Il existe une méthode générale pour construire ce type d'opérateur diagonal, mais elle est assez gourmande en qubits. Dans les chapitres suivants, des méthodes qui tirent parti de la forme particulière de f seront présentées. Bien sûr, ce type d'algorithme ne donne qu'une méthode pour simuler le système, et la complexité réside aussi dans la manière de mesurer et d'extraire de l'information de la fonction d'onde finale.

Une famille de systèmes qui se prêtent bien à la simulation par des ordinateurs quantiques est celle des applications quantiques. Plusieurs algorithmes ont déjà été développés pour différents modèles issus du chaos quantique. On peut citer l'application du boulanger [78], qui a déjà a été implémentée sur 3 qubits en utilisant la résonance magnétique nucléaire [94], ainsi que le rotateur pulsé [43] et l'application en dents de scie [10]. Le calcul de quantités physiques intéressantes dans les modèles dynamiques a aussi été abordé dans [32, 31]. Dans une optique voisine, il existe aussi des algorithmes quantiques permettant de simuler des systèmes chaotiques classiques [44].

Dans cette thèse, nous expliciterons et développerons des algorithmes mieux adaptés aux applications pulsées (comme le rotateur pulsé ou le modèle de Harper pulsé). Nous discuterons également l'extraction d'informations à partir de tels algorithmes.

Chapitre 3

Simulation du rotateur pulsé

3.1 Applications Quantiques : exemple du rotateur pulsé

3.1.1 Rotateur pulsé classique

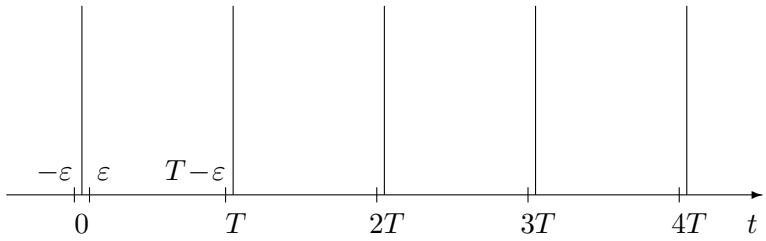
Pour étudier le chaos dynamique, il est intéressant de disposer d'un modèle simple qui soit aisé à simuler, mais qui reproduise néanmoins les caractéristiques essentielles. Si on prend un système dynamique dont l'hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps, alors il faut au moins 2 degrés de liberté pour voir apparaître un comportement chaotique (un système à un seul degré de liberté est intégrable si l'énergie est conservée). Une autre solution est de choisir un système à un seul degré de liberté, mais dépendant du temps. Parmi ces systèmes, une classe de modèles très étudiée [26] est celui des applications pulsées, définies par le Hamiltonien

$$H(q,p,t) = H_0(p) + V(q) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(t - mT) \tag{3.1}$$

dont le comportement est régi par les équations du mouvement classiques

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \ , \ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

Le système évolue donc librement selon $H_0(p)$, mais subit périodiquement des perturbations externes de potentiel $V(q)$, sous la forme d'impulsions infiniment courtes. Pour étudier ce modèle, on se ramène à une application discrète en ne considérant l'état du système qu'aux instants qui précèdent immédiatement les impulsions (c'est-à-dire les temps de la forme $mT - \varepsilon$, avec ε infinitésimal).



On peut alors écrire l'état du système $(\bar{q}, \bar{p})$ à l'instant $(m+1)T - \varepsilon$ en fonction de (q, p), l'état à l'instant précédent $mT - \varepsilon$. Cette relation ne dépend pas de m à cause de la périodicité en temps de H, donc on prendra $m = 0$ pour simplifier le calcul. De plus, on peut remarquer que p est constant entre ε et $T - \varepsilon$.

$$\begin{aligned}
\bar{p} - p &= \int_{-\varepsilon}^{T-\varepsilon} \dot{p}\,\mathrm{d}t \\
&= \int_{-\varepsilon}^{T-\varepsilon} -V'(q) \sum_m \delta(t - mT)\,\mathrm{d}t \\
&= \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} -V'(q)\delta(t)\,\mathrm{d}t = -V'(q) \\
\bar{q} - q &= \int_{-\varepsilon}^{T-\varepsilon} \dot{q}\,\mathrm{d}t \\
&= \int_{-\varepsilon}^{T-\varepsilon} H_0'(p)\,\mathrm{d}t = H_0'\left(p(\varepsilon)\right) T = H_0'(\bar{p})T
\end{aligned}$$

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \bar{p} &=& p - V'(q) \\ \bar{q} &=& q + TH_0'(\bar{p}) \end{array} \right. \tag{3.2}$$

Pour calculer l'état du système à n'importe quel instant $mT - \varepsilon$, il suffit donc d'itérer cette application m fois à partir de l'état initial.

Une autre façon de construire l'application (3.2) est de partir non pas d'un système à un degré de liberté dépendant du temps comme (3.1) mais d'un système conservatif adéquat à 2 degrés de liberté, et de restreindre l'étude aux instants où l'un des paramètres passe par une valeur donnée (sections de Poincaré). À cause de la conservation de l'énergie, la variété sur laquelle s'effectue le mouvement est alors bien une surface dans l'espace des phases.

Un cas particulier très populaire de cette classe de modèles est celui du rotateur pulsé (aussi appelé application standard ou application de Chirikov [24, 25]). On suppose que (q, p) sont des variables d'angle et de moment cinétique (θ, p), et on choisit un hamiltonien d'évolution libre de la forme

$H_0(p) = \frac{p^2}{2}$ et un potentiel $V(\theta) = k\cos(\theta)$ $(k \geq 0)$, ce qui donne l'hamiltonien

$$H(\theta, p, t) = \frac{p^2}{2} + k\cos(\theta)\sum_m \delta(t - mT) \tag{3.3}$$

et l'application

$$\begin{cases} \bar{p} &= p + k\sin(\theta) \\ \bar{\theta} &= \theta + T\bar{p} \bmod 2\pi \end{cases} \tag{3.4}$$

Malgré sa simplicité apparente, cette application possède de nombreuses propriétés et est utilisée pour modéliser des systèmes physiques très variés. Par exemple, le mouvement d'une comète autour du Soleil perturbé par Jupiter, ou le mouvement d'une particule chargée dans un piège magnétique peuvent tous deux être décrits par l'application standard.

Puisque θ est un angle, la topologie de l'espace des phases est cylindrique. De plus, l'application est périodique en p, de période $\frac{2\pi}{T}$. On peut donc se contenter d'étudier l'espace des phases sur une seule cellule de $2\pi \times \frac{2\pi}{T}$ (fig. 3.1).

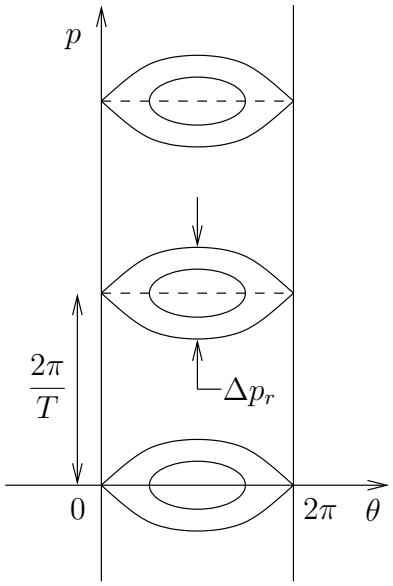


FIG. 3.1 – Représentation schématique de l'espace des phases du rotateur pulsé. Les courbes représentent quelques trajectoires appartenant aux résonances principales, de largeur Δp_r.

Si l'on effectue le changement de variable $x = \frac{\theta}{2\pi}$ et $y = \frac{Tp}{2\pi}$, alors l'application (3.4) peut se réécrire sous la forme

$$\begin{cases} \bar{y} &= y + \frac{K}{2\pi}\sin(2\pi x) \\ \bar{x} &= x + \bar{y} \end{cases} \tag{3.5}$$

On voit donc que la dynamique du système est complètement déterminée par le seul paramètre $K = kT$, en plus bien sûr des conditions initiales. Avec

ces nouvelles variables, une cellule dans l'espace des phases est paramétrée par x et y variant entre 0 et 1.

Pour $K = 0$, le système est intégrable (y est une quantité conservée), et le mouvement d'un point s'effectue le long de lignes à y constant, qui sont des tores à une dimension [77]. Toutes les orbites pour lesquelles $y_0 = \frac{N}{M}$ (avec N et M entiers premiers entre eux) sont périodiques de période M. Autrement dit, si on réécrit l'application (3.5) comme l'action d'un opérateur R

$$\begin{pmatrix} y_{m+1} \\ x_{m+1} \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} y_m \\ x_m \end{pmatrix}$$

alors tous les points pour lesquels $y_0 = \frac{N}{M}$ sont des points fixes de R^M. Si y_0 est irrationnel, alors l'orbite ne se répète jamais et parcourt la ligne $y = y_0$ dans son intégralité au cours du temps. On peut définir une quantité appelée nombre d'enroulement par l'écart moyen entre deux valeurs successives de x sur une orbite

$$w = \lim_{m \to \infty} \frac{x_m - x_0}{m}$$

Pour $K = 0$, le nombre d'enroulement est simplement $w = y_0$. Cette définition va permettre de caractériser les orbites, périodiques ou non, pour $K \neq 0$. On appelle les orbites périodiques de nombre d'enroulement $w = \frac{N}{M}$ des cycles d'ordre M. Le mouvement d'un point sur cette orbite est dit résonnant.

Lorsque l'on ajoute la perturbation ($K \neq 0$), l'application cesse d'être intégrable, et l'interaction entre les résonances non linéaires conduit à l'apparition du chaos. Kolmogorov, Arnol'd et Moser (appelés affectueusement KAM) ont développé une théorie perturbative en K qui peut être appliquée aux régions non résonantes de l'espace des phases sous certaines conditions de régularité du potentiel V [60, 77]. Ces conditions étant vérifiées par l'application standard, sa transition vers le chaos sera orchestrée selon le théorème KAM.

Dès que $K > 0$, les tores dont le nombre d'enroulement est rationnel se transforment instantanément en des chaînes d'îlots intégrables. Ce phénomène s'explique par le fait que le comportement général de l'application standard est alors essentiellement gouverné par le flot près des points fixes. Supposons que (x_f, y_f) soit un point fixe de R^M

$$\begin{pmatrix} y_f \\ x_f \end{pmatrix} = R^M \begin{pmatrix} y_f \\ x_f \end{pmatrix}$$

On linéarise alors l'application (3.5) autour de ce point, en posant $x_i =$

$x_f + \delta x_i$ et $y_i = y_f + \delta y_i$

$$\begin{pmatrix} \delta y_M \\ \delta x_M \end{pmatrix} = \nabla R^M \begin{pmatrix} \delta y_0 \\ \delta x_0 \end{pmatrix}$$

avec

$$\nabla R^M = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_M}{\partial y_0} & \frac{\partial y_M}{\partial x_0} \\ \frac{\partial x_M}{\partial y_0} & \frac{\partial x_M}{\partial x_0} \end{pmatrix}$$

Les deux valeurs propres λ_1 et λ_2 de ∇R^M déterminent le type de flot aux alentours du point fixe. Comme l'application R préserve les surfaces, $\det\left(\nabla R^M\right) = \lambda_1\lambda_2 = 1$. Deux cas peuvent se présenter :

- λ_1 et λ_2 sont complexes de module 1, le flot est alors elliptique
- λ_1 et λ_2 sont réelles, le flot est alors hyperbolique

À cause de la direction du flot aux environs des points fixes, deux points d'un même type ne peuvent pas être contigus dans l'espace des phases. De plus, si P_f est un point fixe de R^M, alors RP_f, R^2P_f, ..., $R^{M-1}P_f$ le sont aussi. Pour chaque nombre d'enroulement $w = \frac{N}{M}$, on aura donc deux cycles d'ordre M entrelacés, l'un elliptique et l'autre hyperbolique, du moins tant que K n'est pas trop grand.

Prenons comme exemple le cycle d'ordre 1, qui admet comme points fixes $(0,0)$ et $(\frac{1}{2},0)$. En linéarisant R près de ces points on obtient

$$\begin{pmatrix} \delta y_1 \\ \delta x_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & k\cos(2\pi x_f) \\ T & 1 + kT\cos(2\pi x_f) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta y_0 \\ \delta x_0 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres locales de cette application linéarisée sont alors

$$\lambda_\pm = \frac{2 + K\cos(2\pi x_f)}{2} \pm \sqrt{K\cos(2\pi x_f)\left(1 + \frac{K\cos(2\pi x_f)}{4}\right)}$$

Pour $x_f = 0$, λ_+ et λ_- sont réelles avec $\lambda_+ > 1$, donc le flot autour du point $(0,0)$ va être hyperbolique, comme représenté sur la figure 3.2. En $x_f = \frac{1}{2}$, λ_+ et λ_- sont complexes de module 1, et le flux est elliptique autour de ce point.

Pour $K > 0$, les cycles d'ordre M sont donc des chaînes de M îlots chacune. Sur la figure 3.3, pour $K = 0{,}5$, on peut voir par exemple tous les cycles jusqu'à l'ordre 5. Le chaos commence à se développer le long des séparatrices, et notamment autour des points fixes hyperboliques. Les tores dont le nombre d'enroulement est irrationnel ont eux un comportement totalement différent. D'après le théorème KAM, ces tores, appelés judicieusement tores KAM, sont préservés en présence d'une faible perturbation. En effet, le destin de ces tores est dicté par le comportement des

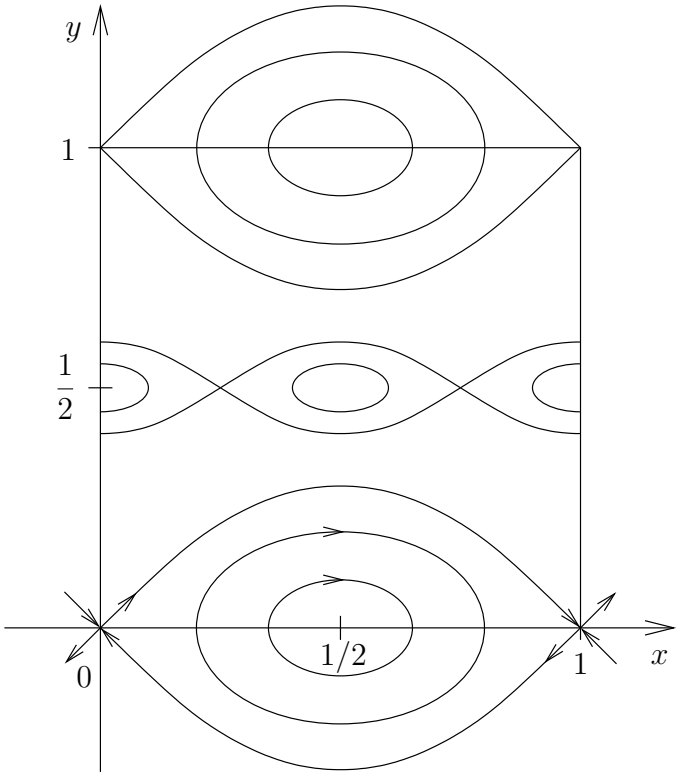


FIG. 3.2 – Résonances d'ordre 1 et 2 du rotateur pulsé.

chaînes d'ilôts qui les jouxtent. Chaque tore KAM est bordé par une infinité d'orbites périodiques, dont l'influence va être d'autant plus grande que celles-ci seront proches dans l'espace des phases. À ce titre, les orbites les plus prépondérantes sont celles dont le nombre d'enroulement est une approximation rationnelle de celui du tore KAM considéré. Cependant, la largeur de ces chaînes de résonances décroît fortement lorsque l'ordre M du cycle augmente. En d'autres termes, plus les résonances sont proches du tore, plus leur largeur est faible. Selon le théorème KAM, ces deux effets se compensent et la somme des largeurs converge. Ceci explique pourquoi les tores KAM peuvent survivre même pour $K \neq 0$. Lorsque K augmente, ils sont tout d'abord simplement déformés par les résonances voisines, puis à terme rompus lorsque celles-ci deviennent trop importantes.

Le nombre d'enroulement w d'un tore KAM peut s'écrire sous la forme d'une fraction continue

$$w = [a_0, a_1, a_2, a_3, \ldots] = a_0 + \cfrac{1}{a_1 + \cfrac{1}{a_2 + \cfrac{1}{a_3 + \cdots}}}$$

avec a_i entier et $a_i \geq 1 \; \forall \, i \geq 1$ (si on se restreint à une seule cellule de l'espace des phases, $a_0 = 0$). On peut alors obtenir une bonne approximation rationnelle de w en tronquant ce développement à un ordre donné (ce qui revient à prendre un des coefficient $a_i = \infty$). Plus précisément, si $w = [a_0, a_1, a_2, \ldots]$, alors les approximants rationnels $\frac{N_i}{M_i}$ donnés par $\frac{N_i}{M_i} = [a_0, a_1, \ldots, a_i, \infty]$ sont les meilleurs qui existent, c'est-à-dire que

$$\left| w - \frac{N}{M} \right| \geq \left| w - \frac{N_i}{M_i} \right| \; \forall \; M, N \text{ avec } M < M_{i+1}$$

Ainsi, on peut étudier un tore KAM de nombre d'enroulement w en construisant la suite des orbites périodiques de nombres d'enroulement $\frac{N_i}{M_i}$ qui convergent vers ce tore. Comme la largeur de leurs résonances décroît lorsque M_i augmente, le tore KAM peut rester intact pour de faibles valeurs de K malgré la présence d'orbites périodiques arbitrairement proches.

Lorsque l'on augmente K, les tores KAM vont donc être détruits les uns après les autres par l'expansion des résonances voisines. Sur la figure 3.3, on peut voir par exemple pour $K = 0{,}8$ que l'espace des phases est constitué de zones chaotiques constellées d'ilôts intégrables, et séparées les unes des autres par les tores KAM encore intacts. Il existe une valeur critique de K, K_c, au-delà de laquelle tous les tores KAM sont détruits et les zones chaotiques communiquent toutes entre elles. Les derniers tores à être détruits sont ceux dont les nombres d'enroulement (irrationnels) sont les plus difficiles à approximer par des rationnels. C'est le cas des deux tores $w = \frac{1}{\varphi}$ et $w = 1 - \frac{1}{\varphi}$, où φ est le nombre d'or, défini par

$$\varphi = [1, 1, 1, \ldots, 1, \ldots] = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}$$

Comme tous les coefficients du développement sont des 1, la convergence des approximants rationnels vers φ est très lente. Les zones de résonance les plus proches de ces deux tores vont être d'ordre très élevé, et leur finesse va rendre la destruction des tores beaucoup plus difficile. Ils sont encore visibles sur la figure 3.3 pour $K = 0{,}9716 \approx K_c$; pour cette valeur de K, tous les autres tores KAM ont été détruits.

Enfin, lorsque $K > K_c$, l'espace des phases est constitué d'une mer chaotique parsemée d'îlots intégrables, dont la taille se réduit au fur et à mesure que K augmente. Un point situé initialement dans la zone chaotique peut traverser librement tout l'espace des phases dans la direction des moments, ce qui était interdit avant par la présence des tores KAM. En effet, aucune trajectoire ne peut franchir les courbes invariantes correspondant à des orbites périodiques.

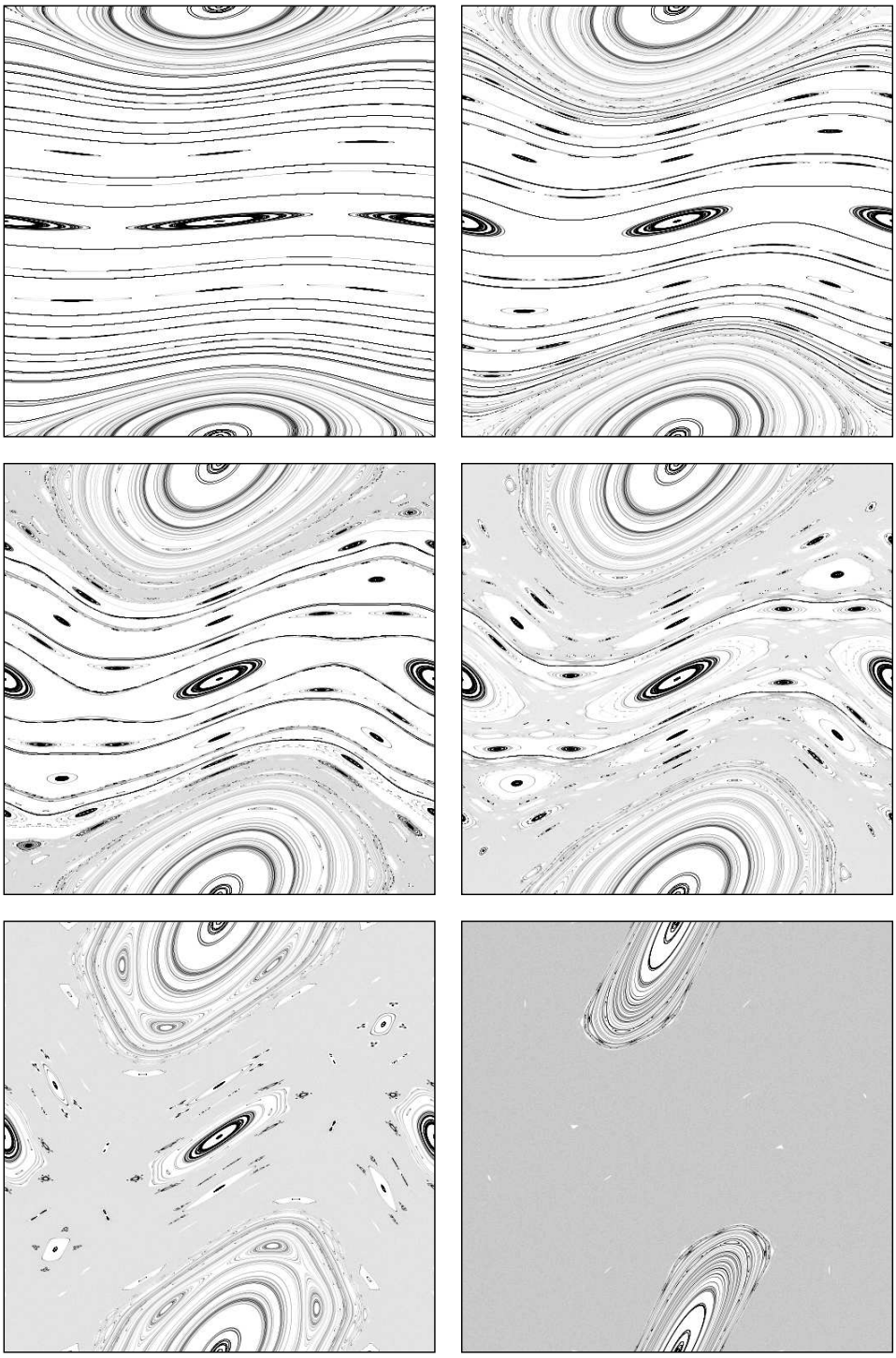


FIG. 3.3 – Espace des phases du rotateur pulsé, pour $K = 0{,}2$, $K = 0{,}5$, $K = 0{,}8$, $K = 0{,}9716$, $K = 1{,}3$ et $K = 3{,}0$ (les courbes correspondent à des trajectoires périodiques, et les zones grises à des trajectoires chaotiques).

Pour déterminer la valeur de K_c, on peut commencer par analyser la résonance principale, d'ordre 1. Si $K = kT$ est faible, alors $|\bar{p} - p| \ll 1$ et $|\bar{\theta} - \theta| \ll 1$, et l'équation aux différences (3.4) peut être vue comme une équation aux dérivées partielles découlant de l'hamiltonien

$$H_r(\theta, p) = \frac{p^2}{2} + \frac{k}{T}\cos\theta$$

Dans ces conditions, le système est équivalent à un pendule simple. La résonance est alors délimitée dans l'espace des phases par une trajectoire particulière, appelée séparatrice, qui sépare les trajectoires liées (oscillations autour du point $(\pi, 0)$) des trajectoires libres. La largeur maximale de la résonance, atteinte pour $\theta = \pi$, est telle que $H_r(0,0) = H_r(\pi, \frac{\Delta p_r}{2})$, d'où

$$\Delta p_r = 4\sqrt{\frac{k}{T}}$$

Ce régime perturbatif, où les résonances sont supposées ne pas interagir entre elles, va nécessairement prendre fin lorsque la résonance principale va entrer en contact avec celle de la cellule du dessus, comme on peut le voir sur la figure 3.1, c'est-à-dire lorsque

$$\Delta p_r \approx \frac{2\pi}{T}$$

Ce critère de recouvrement des résonances (appelé aussi "critère de Chirikov" [23, 26]) donne la valeur $K_c = \frac{\pi^2}{4} \approx 2{,}5$, soit seulement le bon ordre de grandeur (la valeur exacte est $K_c \approx 0{,}9716354$). L'écart est principalement dû à la négligence des résonances d'ordre supérieur. Par exemple sur la figure 3.2, la prise en compte de la résonance d'ordre 2 donne une valeur de K_c inférieure à 2,5, car le recouvrement des résonances intervient plus tôt.

Lorsque $K > K_c$, un système situé dans la zone chaotique peut accéder librement à tout l'espace des phases. Pour étudier le comportement statistique des trajectoires, on se place tout d'abord dans la limite $K \gg K_c$, où la mer chaotique est totalement répandue et les récifs intégrables marginaux. Dans ce cas $|\bar{\theta} - \theta| \gg 2\pi$, ce qui permet de faire une approximation de phase aléatoire, qui consiste à supposer que les valeurs successives de θ_i sont aléatoires et réparties uniformément sur $[0, 2\pi]$. D'après les équations (3.4), le système effectue alors une marche aléatoire en p, ce qui correspond à un comportement diffusif dans la direction des moments cinétiques.

$$\left\langle (p_t - p_0)^2 \right\rangle = D_p t \tag{3.6}$$

La constante de diffusion D_p peut être calculée simplement comme suit, où $\langle \ldots \rangle$ désigne une moyenne uniforme de chaque couple (θ_i, p_i) sur tout

l'espace des phases

$$\langle \ldots \rangle = \prod_i \lim_{p' \to \infty} \frac{1}{2p'} \int_{-p'}^{p'} \mathrm{d}p_i \, \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta_i \ldots$$

$$\begin{aligned} D_p &= \frac{1}{m} \left\langle (p_m - p_0)^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{m} \sum_{i,j=0}^{m-1} \langle (p_{i+1} - p_i)(p_{j+1} - p_j) \rangle \\ &= \frac{k^2}{m} \sum_{i,j=0}^{m-1} \langle \sin\theta_i \sin\theta_j \rangle \end{aligned}$$

Si on suppose que deux valeurs de θ successives sont complètement décorrélées, alors $\langle \sin\theta_i \sin\theta_j \rangle = \delta_{i,j} \langle \sin^2\theta_i \rangle$ et

$$D_p = \frac{k^2}{2}$$

Ceci est une bonne approximation dans la limite $K \to \infty$. Si on prend en compte les corrélations entre θ_i et θ_j pour $j \neq i$, on doit apporter quelques corrections à cette formule. Ces corrélations décroissant très vite lorsque $|j - i|$ augmente, on peut se limiter au premier ordre non nul. De plus, par symétrie $\langle \sin\theta_i \sin\theta_j \rangle$ ne dépend que de $|j - i|$, donc on utilisera pour simplifier les notations $\bar{\theta}$ pour l'itéré de θ, et $\underline{\theta}$ pour l'antécédent de θ.

$$\begin{aligned} \langle \sin\bar{\theta} \sin\theta \rangle &= \langle \sin(\theta + Tp + K\sin\theta) \sin\theta \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \cos(Tp + K\sin\theta) \rangle - \frac{1}{2} \langle \cos(\theta + Tp + K\sin\theta) \rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \sin\bar{\theta} \sin\underline{\theta} \rangle &= \frac{1}{2} \langle \cos(\bar{\theta} - \underline{\theta}) - \cos(\bar{\theta} - \underline{\theta}) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \cos(T(p + \bar{p})) - \cos(2\theta + T(\bar{p} - p)) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \underbrace{\langle \cos(2Tp + K\sin\theta) \rangle}_{0} - \frac{1}{2} \underbrace{\langle \cos(2\theta + K\sin\theta) \rangle}_{J_2(K)} \end{aligned}$$

où J_2 est une fonction de Bessel. Cela conduit à la constante de diffusion [65]

$$D_p \approx \frac{k^2}{2} (1 - 2J_2(K))$$

Empiriquement, on constate que cette formule est une bonne approximation de D_p pour $K > 5$.

Pour K légèrement supérieur à $K_c \approx 0{,}97$, ces approximations sont mises à mal par les fragments des tores KAM. Chaque tore est détruit pour une certaine valeur critique de K. Au dessus de cette valeur, la barrière continue que formait le tore est amputée de tous les segments recouverts par les résonances des orbites périodiques voisines. Ces segments sont d'autant plus petits que l'orbite est d'ordre élevé. Les restes du tore KAM forment ainsi un ensemble de Cantor, appelé fort à propos *Cantores* (*Cantorus* en anglais). Malgré leurs perforations, les Cantores représentent tout de même des obstacles sérieux à la diffusion, surtout lorsque K est à peine supérieur à la valeur critique. Pour $K_c < K < 5$, la constante de diffusion peut être approximée par [26]

$$D_p \approx \frac{(K - K_c)^3}{3T^2}$$

3.1.2 Rotateur pulsé quantique

La version quantique du rotateur pulsé s'obtient en appliquant le principe de correspondance de Bohr à l'hamiltonien de départ (3.3) :

$$H(\hat{\theta}, \hat{p}, t) = \frac{\hat{p}^2}{2} + k\cos(\hat{\theta}) \sum_m \delta(t - mT) \tag{3.7}$$

où $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}$ est l'opérateur moment cinétique. Comme son homologue classique, le rotateur pulsé quantique est un modèle simple mais très riche, qui peut décrire de nombreux systèmes physiques [19, 26, 54, 81]. Il modélise par exemple l'ionisation d'un atome de Rydberg par un champ électrique monochromatique uniforme [20, 59], et la localisation d'Anderson en physique du solide [36, 46], qui sera développée plus loin. Le rotateur pulsé quantique a été réalisé expérimentalement avec des atomes de césium ultra-froids dans une onde lumineuse stationnaire proche de la résonance, pulsée périodiquement. Les effets de la localisation dynamique, du bruit extérieur et de la décohérence ont pu ainsi être étudiés expérimentalement [2, 70].

La fonction d'onde du rotateur $|\psi(t)\rangle$ vérifie l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(\hat{\theta}, \hat{p}, t)\,|\psi(t)\rangle$$

On peut résoudre formellement cette équation en introduisant l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ tel que

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$$

avec

$$U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(\hat{\theta},\hat{p},t)\mathrm{d}t\right)$$

L'équivalent quantique de l'application standard classique est obtenu en ne considérant que les états $|\psi(mT)\rangle$ du système juste avant les impulsions $|\psi(mT)\rangle = \lim_{\varepsilon\to 0}|\psi(mT-\varepsilon)\rangle$. On peut alors passer de l'état $|\psi(mT)\rangle$ à l'état suivant $|\psi((m+1)T)\rangle$ par application de l'opérateur de Floquet U_F [90]

$$|\psi((m+1)T)\rangle = U_F\,|\psi(mT)\rangle$$

où U_F est défini par

$$U_F = \lim_{\varepsilon\to 0} U(T-\varepsilon,-\varepsilon)$$

$$\begin{aligned}
U(T-\varepsilon,-\varepsilon) &= U(T-\varepsilon,\varepsilon)\,U(\varepsilon,-\varepsilon)\\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{\varepsilon}^{T-\varepsilon}\frac{\hat{p}^2}{2}\mathrm{d}t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\frac{\hat{p}^2}{2}+k\cos\hat{\theta}\,\delta(t)\mathrm{d}t\right)\\
&= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2}(T-2\varepsilon)\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hat{p}^2}{2}2\varepsilon+k\cos\hat{\theta}\right)\right)
\end{aligned}$$

On arrive ainsi à une forme simple de l'opération d'évolution entre deux états successifs

$$U_F = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{T\hat{p}^2}{2}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}k\cos\hat{\theta}\right) \tag{3.8}$$

Il faut noter que, bien que l'hamiltonien d'évolution libre et l'hamiltonien responsable des impulsions ne commutent pas, U_F s'écrit sous la forme d'un produit entre un opérateur qui ne dépend que de $\hat{\theta}$ et un opérateur qui ne dépend que de $\hat{p}$. C'est la brièveté des impulsions qui permet d'obtenir une expression analytique pour l'opérateur d'évolution, et incidemment la séparation entre les phases d'évolution libre et les phases d'impulsions. C'est l'un des grands avantages des modèles pulsés.

L'hamiltonien $H(\hat{\theta},\hat{p},t)$ est invariant par translation dans le temps de T. On peut donc trouver une base propre commune à H et à l'opérateur de translation dans le temps T_T. D'après le théorème de Floquet (analogue du théorème de Bloch pour les systèmes périodiques en temps et non pas spatialement), si $|\psi_n(t)\rangle$ est un de ces vecteurs propres communs

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-i\omega_n t}\,|u_n(t)\rangle$$

avec $|u_n(t)\rangle$ périodique : $|u_n(t+T)\rangle = |u_n(t)\rangle$.

$$\begin{aligned} U_F\,|\psi_n(t)\rangle = |\psi_n(t+T)\rangle &= e^{-i\omega_n(t+T)}\,|u_n(t+T)\rangle \\ &= e^{-i\omega_n T}e^{-i\omega_n t}\,|u_n(t)\rangle \\ &= e^{-i\omega_n T}\,|\psi_n(t)\rangle \end{aligned}$$

U_F a donc pour valeurs propres $e^{-i\omega_n T}$. Si H était indépendant du temps, avec pour énergies propres E_n, U_F aurait pour valeurs propres $e^{-i\frac{E_n}{\hbar}T}$. Par analogie, les $\hbar\omega_n$ sont appelées des *quasi-énergies*. Comme la phase de Floquet $\omega_n T$ n'est définie que modulo 2π, ces quasi-énergies ne sont définies qu'à un multiple de $\frac{2\pi\hbar}{T}$ près.

Soit $|p\rangle$ les vecteurs propres de l'opérateur moment cinétique $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}$. Ces vecteurs ont pour représentation dans la base $|\theta\rangle$

$$\langle\theta\,|\,p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p\theta}$$

On peut donc passer de la représentation de $|\psi\rangle$ dans la base $|\theta\rangle$ à celle dans la base $|p\rangle$ par une simple transformée de Fourier

$$\begin{aligned} \langle p\,|\,\psi\rangle &= \int \langle p\,|\,\theta\rangle\,\langle\theta\,|\,\psi\rangle\ \mathrm{d}\theta \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-\frac{i}{\hbar}p\theta}\,\langle\theta\,|\,\psi\rangle\ \mathrm{d}\theta \end{aligned}$$

Or $\langle\theta+2\pi|\psi\rangle = \langle\theta|\psi\rangle$, donc le moment cinétique p est quantifié : $\langle p|\psi\rangle$ est non nul pour $p = n\hbar$, avec n entier. On peut alors définir une autre base $|n\rangle = \sqrt{\hbar}\,|p\rangle$, telle que $\hat{p}\,|n\rangle = n\hbar\,|n\rangle$. L'expression de $|n\rangle$ dans la base $|\theta\rangle$ est donnée par

$$\langle\theta\,|\,n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\theta}$$

Cependant, $\langle n|\psi\rangle$ étant quantifiée, il est plus pratique de travailler avec les coefficients de Fourier $\psi_m^{(n)}$ tels que

$$\langle n\,|\,\psi\rangle = \sum_{m=-\infty}^{+\infty}\psi_m^{(n)}\delta(n-m)$$

Le passage entre la représentation $|\theta\rangle$ et la représentation $|n\rangle$ se fait alors par simple développement en série de Fourier

$$\psi_n^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{2\pi} e^{-in\theta}\,\langle\theta\,|\,\psi\rangle\ \mathrm{d}\theta \tag{3.9}$$

$$\langle\theta\,|\,\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta}\psi_n^{(n)} \tag{3.10}$$

Si l'on introduit l'opérateur $\hat{n} = -i\frac{\partial}{\partial\theta}$ tel que $\hat{n}\,|n\rangle = n\,|n\rangle$, U_F devient :

$$U_F = \exp\left(-i\hbar T\frac{\hat{n}^2}{2}\right)\exp\left(-i\frac{K}{\hbar T}\cos\hat{\theta}\right) \tag{3.11}$$

avec toujours $K = kT$. Mais contrairement au rotateur pulsé classique, le système dépend cette fois de deux paramètres, K et $\hbar T$. K détermine entièrement le comportement du système dans la limite semi-classique, et $\hbar$ gouverne les spécificités quantiques si on choisit $T = 1$, ce qui sera dorénavant le cas.

On peut écrire (3.11) sous forme de matrice dans la base $|n\rangle$

$$\begin{aligned}
&\langle n\,|U_F|\,m\rangle \\
&\quad= \exp\left(-i\hbar\frac{n^2}{2}\right)\left\langle n\,\middle|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}K\cos\hat{\theta}\right)\middle|\,m\right\rangle \\
&\quad= \exp\left(-i\hbar\frac{n^2}{2}\right)\iint \mathrm{d}\theta\mathrm{d}\theta'\;\langle n\,|\,\theta'\rangle\left\langle\theta'\,\middle|\exp\left(-\frac{i}{\hbar}K\cos\hat{\theta}\right)\middle|\,\theta\right\rangle\langle\theta\,|\,m\rangle \\
&\quad= \exp\left(-i\hbar\frac{n^2}{2}\right)\frac{1}{2\pi}\iint \mathrm{d}\theta\mathrm{d}\theta'\;e^{i(m\theta-n\theta')}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}K\cos\theta\right)\delta(\theta-\theta') \\
&\quad= \exp\left(-i\hbar\frac{n^2}{2}\right)\frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}\theta\;e^{i(m-n)\theta}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}K\cos\theta\right) \\
&\quad= \exp\left(-i\hbar\frac{n^2}{2}\right)(-i)^{m-n}J_{m-n}\left(\frac{K}{\hbar}\right)
\end{aligned} \tag{3.12}$$

où J_{m-n} est une fonction de Bessel. L'opérateur d'impulsion ne dépend que de $(m-n)$; de plus, la valeur de $J_{m-n}\left(\frac{K}{\hbar}\right)$ décroît vite lorsque $|m-n|$ augmente. $\langle n|U_F|m\rangle$ est donc une matrice de bande, avec des éléments importants seulement près de la diagonale.

Dans la pratique, pour simuler le rotateur pulsé quantique sur un ordinateur fini (classique ou quantique), il est nécessaire de clore également l'espace des phases dans la direction des moments. Pour effectuer cette fermeture, on choisit la condition aux limites périodique $\langle p + 2\pi\alpha\,|\,\psi\rangle = \langle p\,|\,\psi\rangle$, ce qui donne à l'espace des phases la topologie d'un tore. Dans l'espace des phases classique, une cellule a une dimension de 2π dans la direction p (avec $T = 1$). Lorsque α est entier, ce nombre représente donc simplement le nombre de cellules choisies (par exemple $\alpha = 2$ sur la figure 3.4). D'autre part, comme $p = n\hbar$, $2\pi\alpha$ doit être un multiple entier de $\hbar$ pour pouvoir assurer la périodicité de $\langle p|\psi\rangle$. On appelle $N = \frac{2\pi\alpha}{\hbar}$ le nombre d'états de l'espace de Hilbert ainsi construit.

La périodisation de l'espace des phases en p provoque à son tour une quantification de $\langle\theta|\psi\rangle$, qui devient non nulle seulement pour $\theta = \frac{2\pi}{N}\Theta$, avec Θ entier. On introduit la nouvelle base $|\Theta\rangle = \sqrt{\frac{2\pi}{N}}\,|\theta\rangle$ telle que $\hat{\theta}\,|\Theta\rangle = \frac{2\pi}{N}\Theta\,|\Theta\rangle$. Sa relation à la base $|n\rangle$ est donnée par

$$\langle\Theta\,|\,n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i2\pi\frac{\Theta n}{N}}$$

De la même manière que les $\psi_m^{(n)}$, on définit les coefficients de Fourier $\psi_m^{(\Theta)}$ tels que

$$\langle\Theta\,|\,\psi\rangle = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \psi_m^{(\Theta)} \delta(\Theta - m)$$

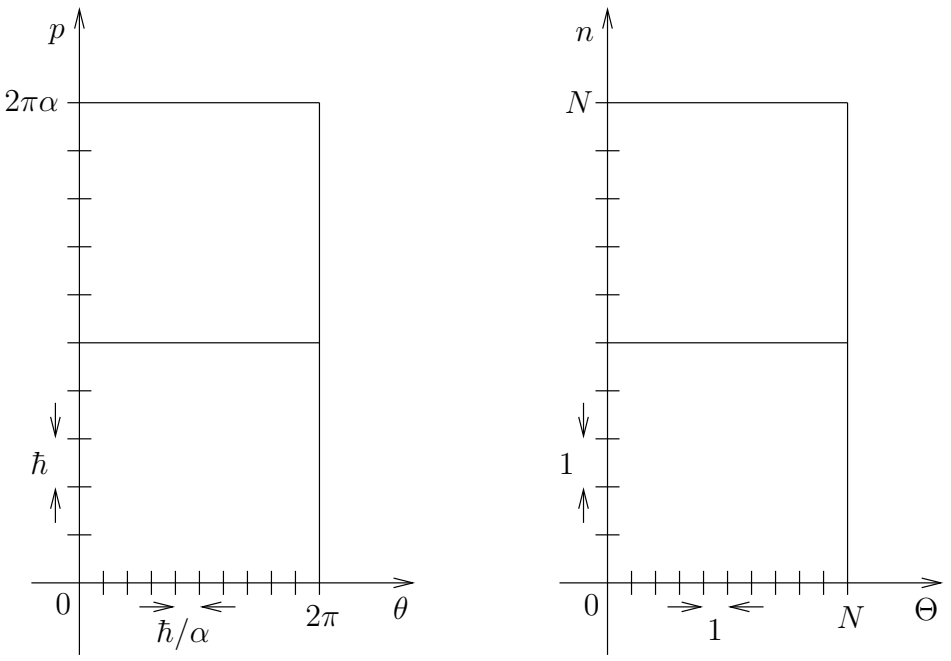


FIG. 3.4 – Discrétisation de l'espace des phases du rotateur pulsé quantique, dans les coordonnées (θ, p) et (Θ, n)

On peut alors entièrement spécifier $|\psi\rangle$ grâce à N nombres complexes, qui sont soit les $\psi_m^{(\Theta)}$ dans la base $|\Theta\rangle$, soit les $\psi_m^{(n)}$ dans la base $|n\rangle$. Le passage d'une base à l'autre s'effectue facilement grâce à une Transformée de Fourier discrète, directe de la base $|n\rangle$ vers la base $|\Theta\rangle$ et inverse dans l'autre sens

$$\psi_\Theta^{(\Theta)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i2\pi\frac{\Theta n}{N}} \psi_n^{(n)} \tag{3.13}$$

$$\psi_n^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\Theta=0}^{N-1} e^{-i2\pi \frac{\Theta n}{N}} \psi_\Theta^{(\Theta)} \tag{3.14}$$

La Transformée de Fourier rapide permet d'ailleurs, grâce à ces relations de changement de base, d'appliquer U_F de façon plus efficace qu'avec l'expression (3.12).

3.1.3 Localisation dynamique et localisation d'Anderson

Comme dans le cas classique, on va maintenant étudier la diffusion du moment cinétique. De ce point de vue, le rotateur pulsé quantique a un comportement radicalement différent suivant que $\hbar$ est ou non une fraction rationnelle de 4π [26, 77]. Supposons pour commencer que $\hbar = 4\pi$; alors l'opérateur U_F devient diagonal dans la base $|\theta\rangle$

$$U_F = e^{-i\frac{K}{4\pi}\cos\hat{\theta}}$$

On met à l'instant initial le rotateur dans l'état $n = 0$ ($\psi_m^{(n)}(0) = \delta_{m0}$), ce qui, traduit dans la base $|\theta\rangle$, donne l'état initial $\langle\theta\,|\,\psi(0)\rangle = \frac{1}{2\pi}$. Après un temps t, qui correspond à l'application de t impulsions puisque $T = 1$,

$$\langle\theta\,|\,\psi(t)\rangle = \left\langle\theta\left|U_F^t\right|\psi(0)\right\rangle = \frac{1}{2\pi}e^{-i\frac{Kt}{4\pi}\cos\theta}$$

On peut alors calculer le second moment de la distribution en moment cinétique par

$$\begin{aligned}
\left\langle\hat{n}^2\right\rangle &= \left\langle\psi\left|\hat{n}^2\right|\psi\right\rangle \\
&= \int_0^{2\pi} \langle\psi\,|\,\theta\rangle \left\langle\theta\left|\hat{n}^2\right|\psi\right\rangle \mathrm{d}\theta \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i\frac{Kt}{4\pi}\cos\theta}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right)e^{-i\frac{Kt}{4\pi}\cos\theta}\,\mathrm{d}\theta \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\left(-i\frac{Kt}{4\pi}\cos\theta + \frac{K^2t^2}{(4\pi)^2}\sin^2\theta\right)\mathrm{d}\theta \\
&= \frac{K^2t^2}{(4\pi)^3}
\end{aligned}$$

On voit que $\langle\hat{n}^2\rangle$, et donc l'énergie moyenne du rotateur, augmente quadratiquement avec le temps. Plus généralement, cette croissance quadratique de l'énergie, appelée résonance quantique, intervient aussi pour n'importe quelle valeur rationnelle de $\frac{\hbar}{4\pi}$, excepté $\frac{1}{2}$ (fig. 3.5).

Lorsque $\frac{\hbar}{4\pi}$ n'est pas rationnel, le comportement du moment cinétique est tout autre. Pour les petits temps, l'énergie commence par croître linéairement

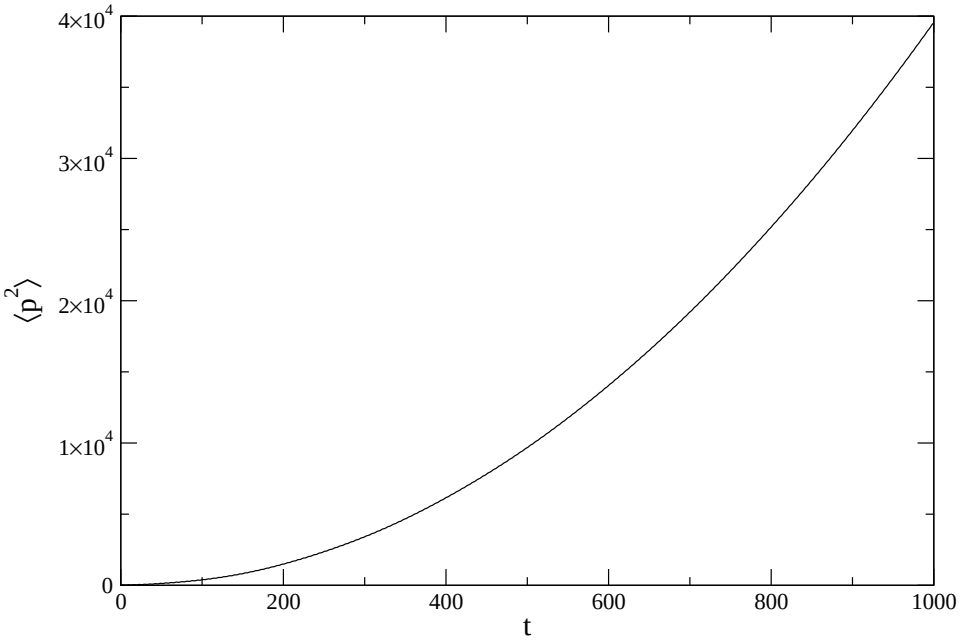


FIG. 3.5 – Croissance quadratique de l'énergie du rotateur pour $\hbar = 4\pi \times \frac{2}{5}$ et $K = 5$.

avec le temps, en suivant la même loi que pour le rotateur pulsé classique. Par contre, aux temps longs $\langle \hat{n}^2 \rangle$ cesse d'augmenter et devient stationnaire, comme on peut le voir sur la figure 3.6. À cet instant, la fonction d'onde est localisée : son extension dans l'espace de Hilbert est limitée à une petite zone de taille l (appelée longueur de localisation) autour de son point de départ, et elle décroît exponentiellement lorsque l'on s'en écarte (fig. 3.7)

$$\psi_m^{(n)} = \frac{1}{2l} e^{-\frac{|m|}{l}}$$

Si on reprend par exemple la condition initiale $\psi_m^{(n)}(0) = \delta_{m0}$, alors

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{n}^2 \right\rangle &= \left\langle \psi(0) \left| U_F^{\dagger\, t} \hat{n}^2 U_F^t \right| \psi(0) \right\rangle \\ &= \sum_n n^2 \left(U_F^t \right)_{n0} \left(U_F^t \right)_{n0}^* \end{aligned} \tag{3.15}$$

On peut diagonaliser U_F grâce à une transformation unitaire V

$$(U_F)_{nm} = \sum_k e^{-i\phi_k} V_{kn}^* V_{km}$$

où les ϕ_k sont les phases de Floquet. En remplaçant dans (3.15), on obtient

$$\left\langle \hat{n}^2 \right\rangle = \sum_{n,k,k'} n^2 e^{it(\phi_{k'} - \phi_k)} V_{kn}^* V_{k0} V_{k'0} V_{k'0}^* \tag{3.16}$$

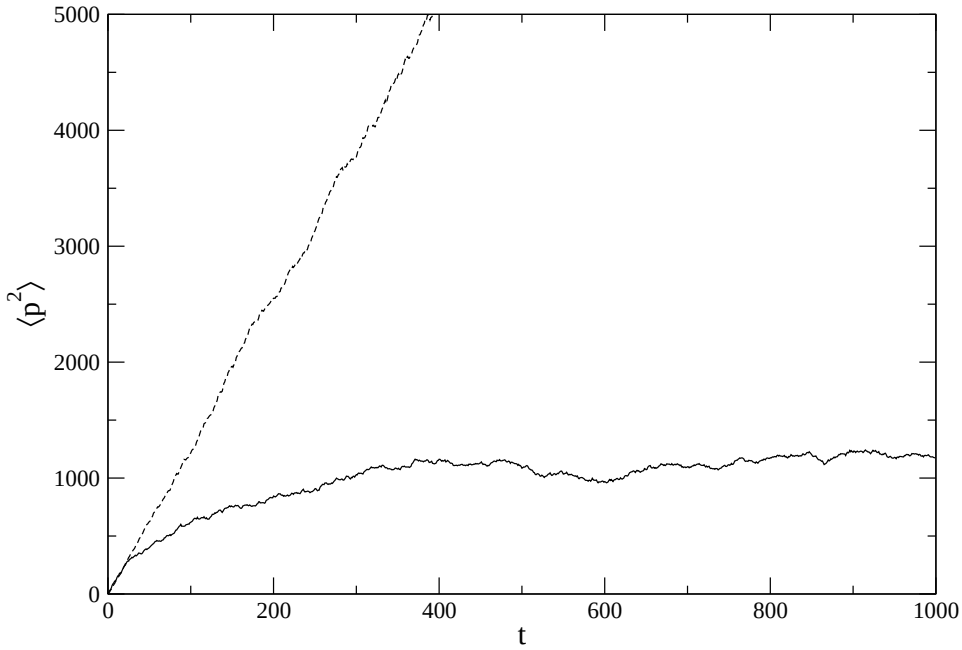


FIG. 3.6 – L'énergie du rotateur tend vers un état stationnaire pour $\hbar = \frac{2}{5}$ et $K = 5$. La courbe en pointillés correspond à la diffusion classique, et celle en trait plein à la localisation quantique avec $p = n\hbar$.

Comme U_F est une matrice de bande, la matrice de changement de base V l'est aussi, ce qui restreint la somme dans (3.16) à approximativement l termes non nuls. Les phases de Floquet étant a priori réparties uniformément sur le cercle, la différence de phase $(\phi_{k'} - \phi_k)$ est en moyenne de l'ordre de $\Delta\phi = \frac{2\pi}{l}$. Cet écart moyen entre quasi-énergies conduit au temps de Heisenberg $t_H \sim \frac{1}{\Delta\phi} \sim l$, qui est le temps pour lequel le système commence à sentir les effets de la discrétisation du spectre. Pour $t \ll t_H$, le système se comporte comme son pendant classique et le second moment diffuse normalement. Mais pour $t \gg t_H$, le facteur de phase dans (3.16) oscille rapidement, et tous les termes pour lesquels $k \neq k'$ s'annulent. On a alors

$$\left\langle \hat{n}^2 \right\rangle = \sum_{n,k} n^2 |V_{kn}|^2 |V_{k0}|^2 \tag{3.17}$$

qui ne dépend plus de t, et la diffusion s'arrête.

La localisation intervient donc pour $t \sim l$. D'autre part, comme la somme dans l'expression (3.17) ne court que sur un domaine de taille l, n^2 ne peut valoir au maximum que l^2, et $\langle \hat{n}^2 \rangle \sim l^2$. Or, jusqu'à $t \sim l$ le système diffuse classiquement selon la loi (3.6), donc $\langle \hat{n}^2 \rangle \sim D_p l$. En rapprochant les deux expressions pour $\langle \hat{n}^2 \rangle$, on obtient la relation trouvée par Chirikov, Izrailev

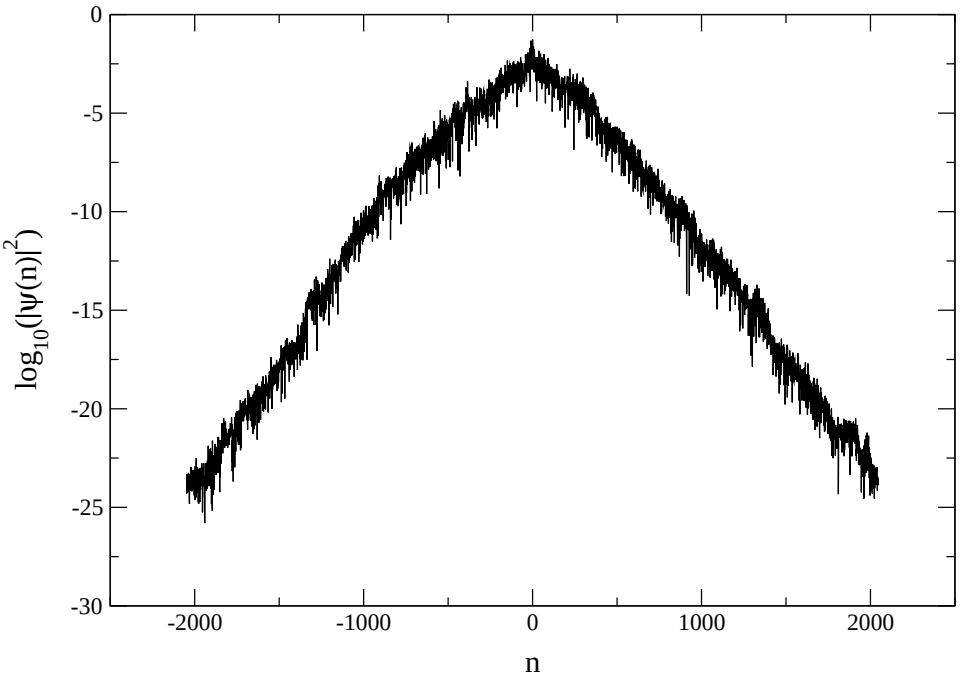


FIG. 3.7 – Localisation de la fonction d'onde du rotateur dans l'espace des moments pour $\hbar = \frac{2}{5}$ et $K = 5$, après 1000 itérations, avec un état initial concentré en $n = 0$.

et Shepelyansky [27, 80, 81]

$$l \sim D_p$$

La longueur de localisation quantique est proportionnelle au coefficient de diffusion classique. Numériquement, on trouve $l = \frac{1}{2}D_p$. La constante de proportionnalité a pu être établie analytiquement dans le cadre d'autres modèles, comme le modèle de Lloyd pour lequel le potentiel des perturbations est donné par

$$V(\theta) = V_0 \arctan(E - 2k\cos\theta)$$

Un dernier point digne d'intérêt peut être abordé par la question suivante : comment peut-on simuler numériquement la localisation du rotateur pulsé quantique, qui intervient pour une valeur irrationnelle de $\frac{\hbar}{4\pi}$, alors que les ordinateurs ne peuvent manipuler essentiellement que des nombres rationnels ? La solution de ce paradoxe apparent tient dans le comportement des résonances quantiques aux hautes harmoniques, c'est-à-dire pour $\frac{\hbar}{4\pi} = \frac{p}{q}$ avec $q \gg 1$. D'après l'équation (3.11), la perturbation est alors de période q et les états propres satisfont le théorème de Bloch

$$\psi(n+q) = \psi(n)e^{iqy}$$

Le module de la fonction propre a ainsi une période de q. D'autre part, celle-ci doit être localisée au sein de chaque période si $l \ll q$. En effet, d'après le principe d'incertitude, la structure fine du spectre n'a aucune influence sur le mouvement pour des échelles de temps courtes, et une petite imprécision sur la valeur de $\frac{\hbar}{4\pi}$ ne doit pas induire un changement de comportement important, même si l'on passe d'une valeur rationnelle à une valeur irrationnelle. De fait, le recouvrement entre les états propres diminue exponentiellement avec le paramètre $q/l \gg 1$. Ainsi, l'énergie suit bien une loi de croissance quadratique

$$E(t) \sim r(q)t^2$$

mais son taux de croissance $r(q)$, qui est lié au taux de transition entre états, est d'autant plus faible que le dénominateur q est grand

$$r(q) \approx \left(\frac{K}{2}\right)^2 e^{-\frac{q}{2\pi l}}$$

On peut définir un temps caractéristique t_q pour lequel la loi de croissance quadratique donne une énergie comparable à celle de l'état localisé $E(t_q) \sim l^2$, soit

$$t_q \sim e^{\frac{q}{4\pi l}}\sqrt{l}$$

Tant que $t \ll t_q$, les états propres restent localisés. Comme t_q augmente exponentiellement avec le dénominateur q, le régime de croissance quadratique devient très vite inobservable pour les hautes harmoniques.

Le phénomène de localisation est présent également dans un modèle célèbre issu de la matière condensée, le modèle d'Anderson [3]. Celui-ci est utilisé pour étudier le comportement d'un électron sur un réseau cristallin désordonné. À une dimension, l'hamiltonien d'un tel système est donné par

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$$

où $V(x)$ est le potentiel créé par un réseau d'atomes régulièrement espacés d'une distance d. Pour résoudre l'équation de Schrödinger, on fait l'hypothèse de fort couplage : l'électron interagit fortement avec un seul atome à la fois, ce qui permet de développer sa fonction d'onde sur la base des fonctions propres monoatomiques $\psi_0(x - nd)$

$$\psi(x) = \sum_n a_n \psi_0(x - nd)$$

avec un recouvrement négligeable entre les sites

$$\int \psi_0^*(x - nd)\, \psi_0(x - md)\, \mathrm{d}x = \delta_{nm}$$

Si $\psi(x)$ est une fonction propre de H, on obtient

$$\sum_{k\neq n} W_{nk}a_k + E_n^0 a_n = Ea_n \tag{3.18}$$

avec

$$\begin{aligned} E_n^0 &= \int \psi_0^*(x-nd)H\psi_0(x-nd)\,\mathrm{d}x \\ W_{nk} &= \int \psi_0^*(x-nd)H\psi_0(x-kd)\,\mathrm{d}x \end{aligned}$$

Si le potentiel V est périodique, alors E_n^0 est indépendant de n, et W_{nk} ne dépend que de $(n-k)$. On retombe alors sur le modèle standard de la conduction dans les solides, avec un spectre sous forme de bandes. Le modèle d'Anderson consiste à prendre un potentiel V non plus périodique mais perturbé par un désordre aléatoire, provoqué par exemple par des défauts dans l'agencement cristallin ou par des impuretés. Pour ce faire, on peut introduire soit un désordre dans les liaisons, auquel cas les W_{kn} sont aléatoires de site en site alors que les E_n^0 restent constants, soit un désordre sur site, en prenant des énergies de site E_n^0 aléatoires et en gardant les W_{kn} constants.

Prenons le cas d'un désordre de site, en se restreignant à une interaction avec les plus proches voisins. L'équation (3.18) devient

$$Wa_{n+1} + Wa_{n-1} + E_n^0 a_n = Ea_n$$

On peut la réécrire sous la forme matricielle

$$\begin{pmatrix} a_{n+1} \\ a_n \end{pmatrix} = T_n \begin{pmatrix} a_n \\ a_{n-1} \end{pmatrix}$$

où T_n est la matrice de transfert donnée par

$$T_n = \begin{pmatrix} (E-E_n^0)/W & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Si l'on considère une chaîne de N sites, l'état du bout de la chaîne peut être obtenu à partir de celui du début en appliquant plusieurs fois la matrice de transfert

$$\begin{pmatrix} a_{N+1} \\ a_N \end{pmatrix} = T_N T_{N-1} \dots T_2 T_1 \begin{pmatrix} a_1 \\ a_0 \end{pmatrix}$$

Comme les matrices T_n ont un déterminant de module 1, on peut (sous certaines conditions) leur appliquer le théorème de Furstenberg [39]

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln \mathrm{Tr}(T_N T_{N-1} \dots T_2 T_1) = \gamma > 0$$

D'après ce théorème, loin du site de départ ($|N| \to \infty$) la matrice $T_N T_{N-1} \dots T_2 T_1$ possède les deux valeurs propres $\exp(\pm N\gamma)$. Pour éviter une croissance exponentielle de la fonction d'onde dans l'une ou l'autre direction, il faut choisir des valeurs particulières de a_0, a_1 et E. Les énergies propres du modèle d'Anderson ne forment ainsi pas un continuum et constituent un spectre discret. La fonction d'onde de l'électron est alors localisée exponentiellement de part et d'autre du site de départ, avec une longueur de localisation $\frac{1}{\gamma}$ [49, 77, 90]. On peut remarquer que le système est localisé quelle que soit l'intensité du désordre, mais ceci n'est valable qu'en dimension 1. Pour un système de dimension 3 ou plus, il existe un seuil de désordre en dessous duquel la localisation n'a pas lieu. La dimension 2 est un cas marginal pour lequel tous les états sont localisés, mais la longueur de localisation peut être extrêmement grande. On voit donc que les électrons diffusent classiquement mais sont localisés quantiquement ce qui correspond physiquement à un isolant. La compréhension de ces modèles a valu le prix Nobel (1977) à P. W. Anderson [3]. Ce domaine est encore étudié à l'heure actuelle, en particulier l'effet des interactions a donné lieu à de nombreuses publications récentes [82, 53, 15, 37, 93, 92].

Grâce à quelques manipulations, le modèle du rotateur pulsé quantique peut être reformulé d'une manière analogue au modèle d'Anderson présenté ci-dessus [36, 46]. On peut écrire l'opérateur de Floquet (3.11) sous la forme (avec toujours $T = 1$)

$$\hat{U}_F = \exp\left(-i\frac{H_0(\hat{n})}{\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{V(\hat{\theta})}{\hbar}\right)$$

On suppose que $\psi^{(n)}$ est la représentation dans la base $|n\rangle$ d'un vecteur propre $|\psi\rangle$ de $\hat{U}_F$ avec la phase propre ϕ

$$U_F\psi^{(n)} = e^{-iH_0(n)/\hbar}e^{-iV(\theta)/\hbar}\psi^{(n)} = e^{-i\phi}\psi^{(n)}$$

$$\text{avec } \psi^{(n)} = \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_k^{(n)} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

En faisant la substitution

$$e^{-iV(\theta)/\hbar} = \frac{1 + iW(\theta)}{1 - iW(\theta)}$$

$$\text{où } W(\theta) = -\tan\frac{V(\theta)}{2\hbar}$$

L'équation aux valeurs propres devient

$$\frac{1 + iW(\theta)}{1 - iW(\theta)}\psi^{(n)} = e^{i(H_0/\hbar - \phi)}\psi^{(n)}$$

ou

$$(1 - e^{i(H_0/\hbar - \phi)})\psi^{(n)} + iW(1 + e^{i(H_0/\hbar - \phi)})\psi^{(n)} = 0$$

On introduit le nouveau vecteur propre $\overline{\psi}^{(n)}$

$$\overline{\psi}^{(n)} = (1 + e^{i(H_0/\hbar - \phi)})\psi^{(n)}$$

Ce qui donne l'équation

$$\frac{1 - e^{i(H_0/\hbar - \phi)}}{1 + e^{i(H_0/\hbar - \phi)}}\overline{\psi}^{(n)} + iW\overline{\psi}^{(n)} = 0$$

ou

$$\tan\left(\frac{\phi - H_0/\hbar}{2}\right)\overline{\psi}^{(n)} + W\overline{\psi}^{(n)} = 0$$

Grâce aux relations de changement de représentation (3.9) et (3.10), on peut enfin réécrire cette dernière équation comme

$$\sum_{k \neq n} W_{n-k}\overline{\psi}_k^{(n)} + E_n^0\overline{\psi}_n^{(n)} = E\overline{\psi}_n^{(n)} \tag{3.19}$$

où les énergies de liaison W_n sont les coefficients de Fourier de $W(\theta)$

$$W_n = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} W(\theta)e^{-in\theta}\mathrm{d}\theta$$

et les énergies E_n^0 et E sont données par

$$E_n^0 = \tan\left(\frac{\phi - H_0(n)/\hbar}{2}\right)$$

et

$$E = -W_0$$

Si on la compare à (3.18), on voit que l'équation (3.19) correspond bien au modèle d'Anderson avec un désordre sur site (les énergies de liaisons W_{nk} dépendent en effet seulement de la différence $(n - k)$). L'obtention de la formulation (3.19) ne dépendant pas explicitement de H_0 et V, cette correspondance entre la localisation dynamique quantique et la localisation d'Anderson est valable aussi pour tous les modèles pulsés en général. La seule différence avec le modèle d'Anderson réside dans le fait que les coefficients E_n^0 ne sont pas statistiquement aléatoires, mais seulement pseudo-aléatoires. De la même manière que pour l'étude de la diffusion, on suppose que $\frac{\hbar}{4\pi}$ est un nombre irrationnel β. Alors, en prenant $\phi = 0$ pour simplifier, les énergies de site sont données par

$$E_n^0 = -\tan\left(\frac{\hbar n^2}{4}\right) = -\tan\left(\pi\beta n^2\right)$$

Comme β est irrationnel, un théorème de Weyl implique que βn^2 mod 1 est uniformément réparti sur $[0, 1]$. Les énergies E_n^0 ont alors pour distribution de probabilité

$$p(E) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{1 + E^2}$$

Il subsiste malgré tout quelques corrélations qui trahissent la nature pseudo-aléatoire des énergies de site, mais cela ne suffit pas à détruire la localisation.

3.2 Résultats sur le rotateur pulsé

Ce modèle incontournable du chaos quantique fait l'objet de l'étude de la publication I ci-après. Il peut être simulé efficacement sur un ordinateur quantique grâce à un algorithme découvert par Georgeot et Shepelyansky [43]. Les détails de cet algorithme sont rappelés dans la publication I. Les premières études des effets des imperfections sur ce modèle sont dues à Song et Shepelyansky [86]. Il est important d'identifier des observables mesurables sur un ordinateur quantique une fois la simulation effectuée, et également de voir comment ces observables sont affectées par les imperfections inhérentes à toute implémentation réaliste. Le but de I est d'étudier précisément un ensemble aussi large que possible d'observables et de voir l'effet d'erreurs effectuées pendant le calcul sur ces observables.

Le modèle d'imperfections étudié ici est celui des erreurs dynamiques. On considère que dans une implémentation physique réaliste d'un ordinateur quantique la précision finie du contrôle conduit à appliquer des portes quantiques imparfaites. Chaque instance d'une porte quantique élémentaire est ainsi légèrement éloignée de sa valeur idéale, tout en restant unitaire.

Illustrons l'effet d'un bruit unitaire aléatoire sur une porte simple : la porte d'Hadamard. Celle-ci peut s'écrire comme $H = \hat{n}_0 \cdot \vec{\sigma}$ avec

$$\hat{n}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}$$

À chaque application de H, celle-ci est remplacée par la porte voisine $H' = \hat{n} \cdot \vec{\sigma}$, où $\hat{n}$ est un vecteur unitaire qui fait un angle β avec $\hat{n}_0$. L'angle β est tiré aléatoirement à chaque application, de manière uniforme entre 0 et $\varepsilon\pi$. ε représente ainsi l'amplitude des imperfections.

Pour effectuer la transformée de Fourier quantique et l'opérateur d'évolution libre, les seules portes nécessaires sont la porte d'Hadamard et la porte de phase contrôlée. Cette porte à deux qubits est également sujette

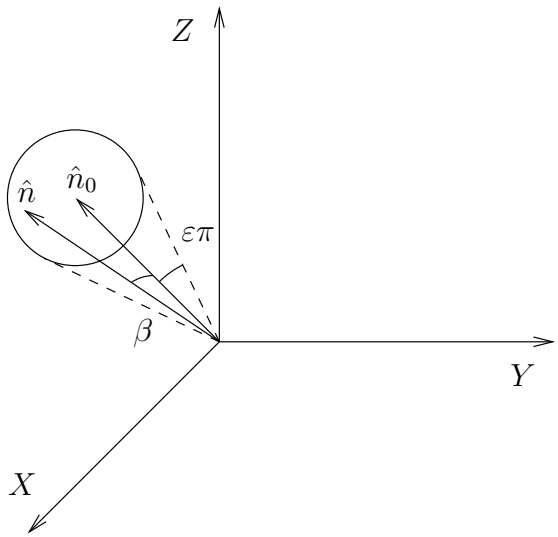


FIG. 3.8 – Modèle d'erreur dynamique pour la porte d'Hadamard.

au bruit unitaire, mais le modèle retenu ici est plus simple :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\alpha} \end{pmatrix} \quad \text{est remplacé par} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i(\alpha+\beta)} \end{pmatrix}$$

avec toujours une distribution aléatoire uniforme entre 0 et $\varepsilon\pi$ pour β. Ce type d'imperfection ne couple pas les états de la base naturelle entre eux, mais les autres types de porte s'en chargeront (comme la porte d'Hadamard). Cette simplification du modèle par rapport à celui qui consisterait à tirer une porte aléatoirement dans $U(4)$ ne change donc pas qualitativement le comportement de l'algorithme. Une autre approximation concerne l'opérateur $\exp\left(-i\frac{K}{\hbar}\cos\hat{\theta}\right)$. Celui-ci a été systématiquement appliqué exactement (sans erreur) lors de la simulation du rotateur pulsé par l'algorithme quantique.

Différents types d'observables ont été envisagés. Tout d'abord, la longueur de localisation est mesurable facilement sur un ordinateur quantique, puisque le nombre de mesures nécessaires pour déterminer l'état du système est alors assez réduit par rapport à la taille de l'espace de Hilbert. Numériquement, elle peut être obtenue à partir de quantités comme le second moment ou l'IPR (inverse participation ratio). La fidélité est aussi une grandeur très utilisée pour caractériser la proximité d'un état réel à un état idéal. Les lois qui régissent sa décroissance en fonction du temps sont très étudiées par ailleurs. Un autre phénomène intéressant est l'effet tunnel assisté par le

chaos [22]. Si le système est placé à l'intérieur d'un îlot intégrable, il peut éventuellement passer par effet tunnel vers un autre îlot. Ce processus est normalement d'autant plus lent que les deux îlots sont éloignés, mais la mer chaotique séparant les deux peut l'accélérer. Enfin, les distributions de Wigner ou d'Husimi (voir appendice A) sont très utiles car elles permettent une comparaison directe de la dynamique avec espace des phases classique. Elles sont de plus abondamment étudiées en calcul quantique, et il existe des algorithmes [69] pour mesurer un point particulier du pseudo-espace des phases de manière efficace.

Dans la publication I ci-après [64], l'effet d'un bruit unitaire dans les portes quantiques a été étudié analytiquement et numériquement sur des réalisations allant jusqu'à 20 qubits. On montre ainsi que toutes les quantités n'ont pas le même comportement face au bruit. La très grande sensibilité au bruit de quelques quantités, comme le second moment de la distribution de probabilité, ou les transitions par effet tunnel à travers des courbes invariantes, a été mise en évidence. Plus précisément, l'échelle de temps au bout de laquelle ces quantités commencent à être affectées augmente exponentiellement avec le nombre de qubits. Cependant, d'autres quantités comme la fidélité ou la distribution de Wigner sont robustes, c'est-à-dire que leur temps caractéristique augmente seulement polynomialement avec l'intensité du bruit et la taille du registre. Ces résultats impliquent que de telles quantités peuvent être calculées de manière fiable en présence d'un bruit modéré.

3.3 Publication I

Quantum computing of quantum chaos in the kicked rotator model
B. Lévi, B. Georgeot and D. L. Shepelyansky
Phys. Rev. E. **67**, 046220 (2003)
quant-ph/0210154

Quantum computing of quantum chaos in the kicked rotator model

B. Lévi, B. Georgeot, and D. L. Shepelyansky
Laboratoire de Physique Quantique, UMR 5626 du CNRS, Université Paul Sabatier, F-31062 Toulouse Cedex 4, France
(Received 21 October 2002; revised manuscript received 6 February 2003; published 25 April 2003)

We investigate a quantum algorithm that simulates efficiently the quantum kicked rotator model, a system that displays rich physical properties and enables to study problems of quantum chaos, atomic physics, and localization of electrons in solids. The effects of errors in gate operations are tested on this algorithm in numerical simulations with up to 20 qubits. In this way various physical quantities are investigated. Some of them, such as second moment of probability distribution and tunneling transitions through invariant curves, are shown to be particularly sensitive to errors. However, investigations of the fidelity and the Wigner and Husimi distributions show that these physical quantities are robust in presence of imperfections. This implies that the algorithm can simulate the dynamics of quantum chaos in presence of a moderate amount of noise.

DOI: 10.1103/PhysRevE.67.046220 PACS number(s): 05.45.Mt, 03.67.Lx, 72.15.Rn

I. INTRODUCTION

It is only recently that it was realized that quantum mechanics can be used to process information in fundamentally new ways. In particular, Feynman [1] emphasized that the massive parallelism due to the superposition principle may allow to simulate efficiently some problems intractable on classical computers, the most obvious being many-body quantum systems. Since that time, a model of quantum computer has been set up, viewed as an ensemble of *n qubits*, i.e., two-level systems, with a Hilbert space of dimension 2^n (see reviews [2–4]). Computation is performed through unitary transformations applied to the quantum wave functions of this many-body system. In fact, it has been shown that any unitary transformation on this 2^n-dimensional space can be written in terms of a set of universal gates, for example, one- and two-qubit transformations. Also, important quantum algorithms have been developed, such as Shor's algorithm for factoring large numbers [5], which is exponentially faster than any known classical method, and Grover's algorithm to search a database [6], where the gain is polynomial.

Motivated by these developments, many experimental implementations for actual realization of such a quantum computer were proposed (see Ref. [4] and references therein). Recent results include, for example, the NMR implementation of factorization algorithm with seven qubits made from nuclear spins in a molecule [7] and the simulation of the quantum baker map [8]. Thus, small quantum computers with a few qubits are already available experimentally, and systems of larger size can be envisioned at relatively short term.

Still, algorithms such as that of Shor require large number of qubits and the use of many gates. It is, therefore, important to develop algorithms that need a smaller number of qubits and gates and still can yield interesting quantities. In particular, algorithms enabling to simulate quantum mechanical systems, as originally envisioned by Feynman, can be implemented relatively easily and solve problems inaccessible to classical computers with less expense in number of qubits and gates. Several such algorithms have been developed for various systems, including many-body Hamiltonians [9] or spin lattices [10]. An especially interesting class of systems corresponds to chaotic quantum maps. Such systems can have a very complex dynamics while their Hamiltonians keep a relatively simple form. Algorithms for fast simulation on a quantum computer were built for the quantum baker map [11], the kicked rotator [12], and the sawtooth map [13]. We note that recently the quantum baker map was implemented on a NMR quantum computer [8]. The kicked rotator is an especially rich and generic system, which has been a cornerstone for the study of quantum chaos [14]. In the classical limit it reduces to the Chirikov standard map, which has been also extensively studied in the field of classical chaos [15]. Implementation of this model can be done on a small quantum computer with a few tens of qubits, and classical supercomputers will be outperformed with a few hundreds of qubits. Still, real quantum computers will not be free of imperfections and errors, and this will affect the results of the computation. It is, therefore, important to understand the effects of different sources of errors on the results of such an algorithm. For example, first numerical simulations of the quantum computation of this model [16] have shown that errors affect in a different way the various physical quantities characterizing the model, and that for some of them the effect of errors can be exponentially strong.

In this paper, after presenting in more detail the physics of the kicked rotator, we study the effects of errors on several physical quantities. We focus on random unitary errors, which may arise when imperfect gates are applied, and study first how global quantities such as second moment or fidelity are affected by errors. Our results confirm and extend those obtained in Ref. [16] showing a marked contrast in the behavior of these two quantities in presence of errors. We also investigate how well the whole wave function is reproduced by an imperfect quantum computer. A particularly interesting way to display wave functions is to express them through phase-space distributions, such as the Wigner and Husimi functions. These distributions display the same information as the wave functions, but in a form which allows direct comparisons between classical and quantum dynamics, a property especially interesting to probe the classical limit of quantum mechanics. They have been extensively used in many fields, and recently a method has been devised [17] to

 ©2003 The American Physical Society

measure such distribution for quantum simulations on quantum computers. The effects of errors on the Wigner and Husimi functions will be investigated in details, showing how imperfections affect the different parts of phase space, and discussing how information can be retrieved through quantum measurement. A separate section is focused on how a localized distribution may escape from an island of integrability, showing an especially large effect of quantum errors on a quantity that is directly relevant to quantum tunneling.

II. THE KICKED ROTATOR

The classical kicked rotator is described by the Chirikov standard map [14,15]:

$$\overline{n}=n+k\sin\theta, \quad \overline{\theta}=\theta+T\overline{n}, \tag{1}$$

where (n,θ) is the pair of conjugated momentum (action) and angle variables, and the bars denote the resulting variables after one iteration of the map. It describes a free angle rotation and a kick in momentum. This area-preserving map has been extensively studied during the past decades and has been applied to problems such as particle confinement in magnetic traps, beam dynamics in accelerators, comet trajectories, and many others [15].

The dynamics of this map takes place on a cylinder (periodicity in θ) and is controlled by a single parameter $K=kT$. For $K=0$ the system is integrable and all trajectories lie on one-dimensional tori (lines $n=$constant). For $K>0$, the system undergoes a transition to chaos, which follows the Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM) theorem. Periodic orbits corresponding to rational frequencies are transformed into chains of integrable islands mixed with chaotic region. On the contrary, tori with irrational frequencies are deformed but survive, forming invariant curves that separate zones in phase space. As K is increased, these surviving tori become Cantor sets (cantori) and disappear. The most robust torus corresponds to the golden number $(1+\sqrt{5})/2$, and disappears for $K=K_g\approx 0.9716\ldots$. Thus, for $K>K_g$ global chaos sets in, with appearance of an extended chaotic region in phase space and with dynamics characterized by a positive Kolmogorov-Sinai entropy $h\approx\ln(K/2)>0$ (for $K\geqslant 6$). In this régime, a typical trajectory shows diffusive growth of momentum, which statistically can be described by the Fokker-Planck equation, with diffusion rate $D=n^2/t\approx k^2/2$, where t is measured in number of iterations (kicks) [14,15]. For lower values of K, the phase space displays a complex hierarchical structure with integrable islands surrounded by chaotic zones at smaller and smaller scales.

Map (1) is periodic in n with period $2\pi/T$, so the phase-space structures repeat themselves on each cell of size $2\pi/T$. Such a cell is shown in Fig. 1 for $K=K_g$, displaying the complex hierarchical structures that appear in the phase space.

The quantization of Eq. (1) yields a Hamiltonian, which after integration over one period gives a unitary evolution operator acting on wave function ψ:

$$\overline{\psi}=\hat{U}\psi=e^{-ik\cos\hat{\theta}}e^{-iT\hat{n}^2/2}\psi, \tag{2}$$

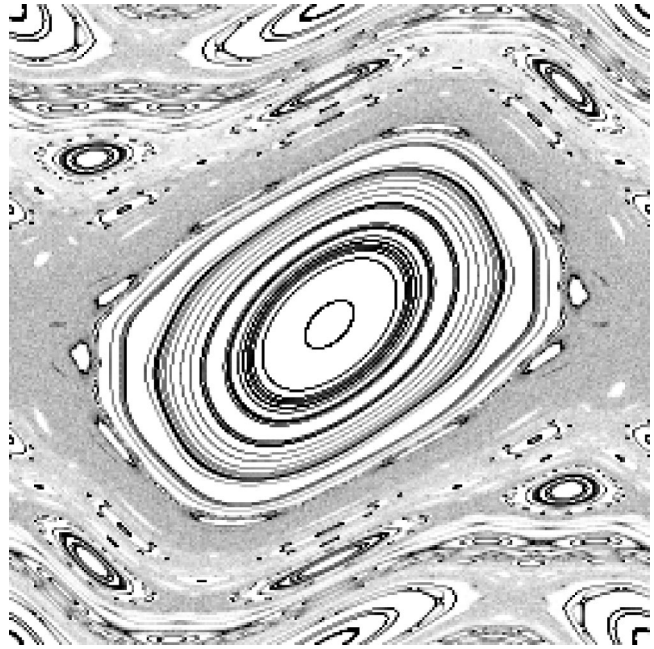


FIG. 1. Plot of the classical phase space at $K=K_g=0.9716\ldots$ [$t=10^4$ iterations of Eq. (1) for 200 points].

where $\hat{n}=-i\partial/\partial\theta$, $\hbar=1$, and $\psi(\theta+2\pi)=\psi(\theta)$. The quantum dynamics depends on two parameters k and T (instead of the single parameter $K=kT$ for the classical one). The classical limit corresponds to $k\to\infty$, $T\to 0$ while keeping $K=kT=$constant [14,18,19]. In a sense, T plays the role of an effective $\hbar$.

Depending on the values of theses parameters, the system follows different régimes, from regularity to quantum chaos. Due to this variety of behaviors, the quantum kicked rotator has been intensively studied (see Refs. [14,18,19] and references therein). Indeed, most of the phenomena characteristic of quantum chaos are present, such as quantum ergodicity, random matrix theory statistics, chaos assisted tunneling, and others. In particular, for $K>K_g$, the phenomenon of dynamical localization appears. Although in this régime a typical classical trajectory diffuses in momentum, eigenstates $\chi_m(n)$ of operator $\hat{U}$ in momentum space are exponentially localized for typical values of k and T. Their envelopes obey the law $\chi_m(n)\sim\exp(-|n-m|/l)/\sqrt{l}$, where m marks the center of the eigenstate and l is the localization length. For $k\gg K\gg 1$ this length is determined by the classical diffusion rate $l=D/2\approx k^2/4$ [18]. This phenomenon has close relationship with the Anderson localization of electrons in disordered solids [20], and investigation of the kicked rotator gives information on this important solid-state problem still under intensive investigation nowadays. The quantum kicked rotator describes also the properties of microwave ionization of the Rydberg atoms [21]. It has been realized experimentally with cold atoms, and the effects of dynamical localization, external noise, and decoherence have been studied experimentally [22].

For numerical studies of quantum evolution (2) it is convenient to choose the case of quantum resonance with $T/(4\pi)=M/N$, where M,N are integers [19]. In this way

the quantum dynamics takes place on a torus with N levels. For $l \gg N$ the eigenstates of evolution operator become ergodic and the level spacing statistics is described by the random matrix theory [19].

The algorithm for the quantum simulation of the kicked rotator was presented in Ref. [12]. Evolution (2) consists of the product of two unitary operators that are diagonal in the angle and momentum bases, respectively. The most efficient classical algorithm available consists in changing back and the forth between the angle and the momentum representation by the fast Fourier transforms (FFT). The operator that is diagonal in the basis is then implemented by direct multiplication of the coefficients of the wave function. In total, one iteration of Eq. (2) on a Hilbert space of dimension $N = 2^{n_q}$ requires $O(N \log N)$ classical operations, the limiting steps being the FFT. The quantum algorithm follows the classical one, and speeds up all parts of it to obtain exponential increase of computation rate. First, an initial distribution is built, in a polynomial number of operations (in n_q). Various initial wave functions can be built in this way. In the following, we will use as initial state $|\Psi_0\rangle$ a wave function localized at a precise value of momentum n, which can be built in n_q single-qubit rotations starting from the ground state. The general state of the system can be written as $\Sigma_{n=0}^{N-1} a_n |n\rangle$, where a_n are the amplitudes of the wave function on the $|n\rangle$ basis state. Then the first unitary operator is applied. In the n representation it is diagonal and can be written as $\exp(-iTn^2/2)$. This operator can be implemented efficiently by using the binary decomposition of n: if $n = \Sigma_{j=0}^{n_q-1} \alpha_j 2^j$, then $n^2 = \Sigma_{j_1,j_2} \alpha_{j_1} \alpha_{j_2} 2^{j_1+j_2}$. Therefore, $\exp(-iTn^2/2) = \Pi_{j_1,j_2} \exp(-iT\alpha_{j_1}\alpha_{j_2} 2^{j_1+j_2-1})$ with $\alpha_{j_{1,2}} = 0$ or 1. Thus, one needs to implement the two-qubit gate applied to each qubit pair (j_1, j_2) that keeps the states $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle$ unchanged, while $|11\rangle$ is transformed to $\exp(-iT2^{j_1+j_2-1})|11\rangle$. $O(n_q^2)$ applications of this gate are sufficient to simulate $\exp(-iTn^2/2)$.

Then a quantum Fourier transform (QFT) (see, e.g., Ref. [2]) is performed to shift from n to θ representation, yielding $\Sigma_{i=0}^{N-1} b_i |\theta_i\rangle$. This transformation needs only $O(n_q^2)$ one- and two-qubit gates, and yields the wave function in θ representation. In this representation, the second operator $\exp(-ik\cos\hat{\theta})$ is diagonal. Direct (sequential) multiplication by $\exp(-ik\cos\theta_i)$ for each θ_i will require exponentially many operations, so a parallel way to apply this operator has to be devised. In Ref. [12], it was proposed to use supplementary registers in which the values of $\cos(\theta_i)$ will be computed in parallel. The procedure transforms $\Sigma_{i=0}^{N-1} b_i |\theta_i\rangle |0\rangle$ into $\Sigma_{i=0}^{N-1} b_i |\theta_i\rangle |\cos\theta_i\rangle$, with $\cos(\theta_i)$ computed up to a fixed precision using a recursive method based on Moivre's formula [12]. This is actually the slowest step of the algorithm, requiring $O(n_q^3)$ elementary operations. From the state $\Sigma_{i=0}^{N-1} b_i |\theta_i\rangle |\cos\theta_i\rangle$, it is easy by using n_q one-qubit operations to build the state $\Sigma_{i=0}^{N-1} b_i \exp(-ik\cos\theta_i)|\theta_i\rangle|\cos\theta_i\rangle$. Then the cosines in the last register are reversibly erased by running backward the sequence of gates that constructed them, and one ends up with the state $\Sigma_{i=0}^{N-1} b_i \exp(-ik\cos\theta_i)|\theta_i\rangle|0\rangle$, which is the result of the action of the unitary operator $\exp(-ik\cos\hat{\theta})$. Another QFT [requiring $O(n_q^2)$ operations] takes the wave function back to the n representation.

Increasing n_q, which exponentially increases the dimension of the Hilbert space available, enables to probe various physical limits in the system. If $K = kT$ is kept constant, the classical mechanics remains the same. If T is kept constant, the effective $\hbar$ is fixed, and increasing n_q will increase exponentially the size of the phase space of the system (number of cells). In contrast, if $T = 2\pi/N$, with $N = 2^{n_q}$, the size of the phase space remains the same, all N momentum states correspond to the same cell of size $2\pi/T$. In this case, increasing n_q increases the number of quantum levels corresponding to the same classical structure, and is equivalent to decreasing $\hbar$ toward the classical limit.

The whole quantum algorithm described above requires $O(n_q^3)$ gate operations to perform one iteration of quantum map (2), exponentially less than the classical algorithm. Still, a physical quantum computer will not be an ideal perfect machine, and there will be imperfections, which may hamper the computation. In the following sections, we will investigate the effects of noise and imperfections on the physical quantities that are simulated, and estimate the accuracy of the quantum computation of quantum map (2). The numerical simulation of many qubits is very resource consuming on a classical computer. Due to that we took in all numerical computations the action of $\exp(-ik\cos\hat{\theta})$ as exact, and performed by direct multiplication in θ representation all other operations being made with errors. We think that this approximation does not alter the qualitative features of the results, although the number of quantum gates is reduced from $O(n_q^3)$ to $O(n_q^2)$. Also in this approximation all supplementary registers required for the computation of $|\cos\theta_i\rangle$ are eliminated and the quantum evolution on $N = 2^{n_q}$ levels is performed with only n_q qubits.

III. GLOBAL QUANTITIES

We first study the effects of imperfections and errors for the global quantities of the system.

To model these imperfections, we introduce a random unitary error during the operation of elementary quantum gates. These errors are present for each gate performing the quantum Fourier transform and the action of the unitary operator $e^{-iT\hat{n}^2/2}$. Two elementary gates are used: the single-qubit Hadamard gates $H = \mathrm{diag}(1,1,1,-1)$ and the two-qubit gate $B = \mathrm{diag}(1,1,1,\exp(i\alpha))$, where α is a phase. Transformation H can be written as $H = \vec{u}_0 \cdot \vec{\sigma}$, where $\vec{u}_0 = (1/\sqrt{2}, 0, 1/\sqrt{2})$ and $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. It is replaced by an imperfect gate $H' = \vec{u} \cdot \vec{\sigma}$, where $\vec{u}$ is a unit vector with a random angle β from $\vec{u}_0$. In a similar way, each B is replaced by $B' = \mathrm{diag}(1,1,1,\exp(i\alpha + i\gamma))$, where γ is again a random angle. At a given strength $\epsilon > 0$ of noise, each gate is implemented with a β or γ randomly selected from a uniform distribution such that $|\beta| < \pi\epsilon$ or $|\gamma| < \pi\epsilon$ [23]. As explained in Sec. II, we made the approximation of taking the action of $\exp(-ik\cos\hat{\theta})$ as exact, all other operations being made with

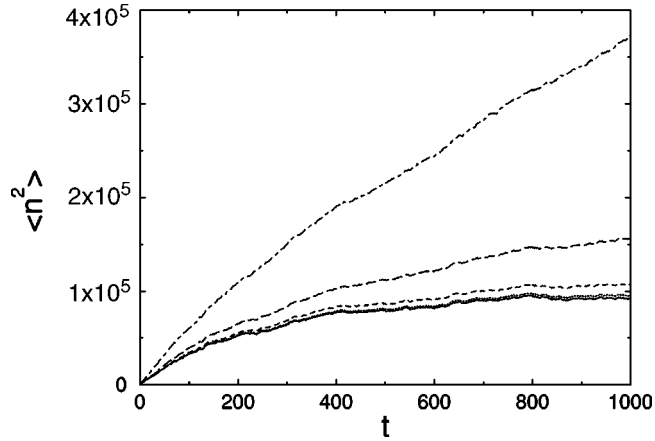


FIG. 2. Dependence of the second moment $\langle n^2\rangle = \langle (n-n_0)^2\rangle$ of the probability distribution on time t for $T=0.5$ and $K=15$. Data are shown from top to bottom for $n_q=16,15,14,13$ and $\epsilon=10^{-4}$ (four curves). The lowest fifth full curve is for $\epsilon=0$, $n_q=14$. The initial state is $|\Psi_0\rangle = |n_0\rangle$, with $n_0=N/2$.

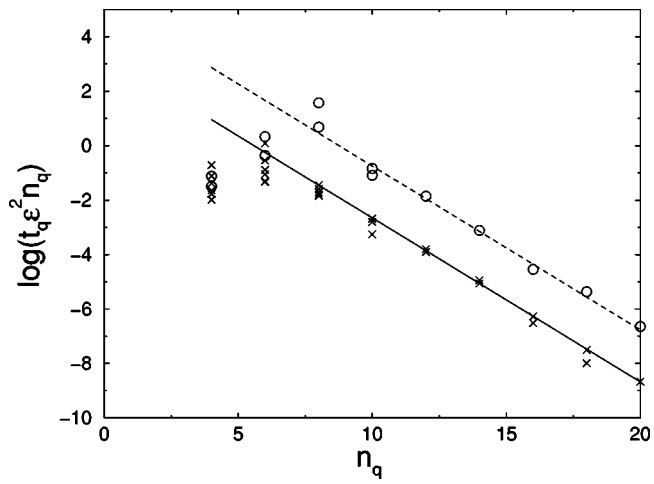


FIG. 3. Dependence of the rescaled time scale t_q on the number of qubits n_q for $10^{-6}<\epsilon<0.03$, $T=0.5$, $K=5$ ($\times$), and $K=15$ ($\bigcirc$). The initial state is $|\Psi_0\rangle = |n_0\rangle$ with $n_0=N/2$. Data are averaged over 10 to 1000 realizations of noise. Full and dashed lines correspond to the theoretical formula (3) with $C_q=0.23$. The logarithm is decimal.

errors. The use of n_q qubits gives a Hilbert space for wave functions of the kicked rotator on N levels, with $N=2^{n_q}$, i.e., values of momentum range from $n=1$ to $n=N$. In all numerical computations, initial state $|\Psi_0\rangle$ was chosen as localized on a precise value of the momentum n_0, i.e., $|\Psi_0\rangle = |n_0\rangle$, with $n_0=1$ (lowest value of momentum) or $n_0=N/2$. The rotation is computed as $\exp[-iT(n-\bar{n})^2/2]$ with $\bar{n}=N/2$.

Depending on the choice of parameters in Eq. (2), increasing the number of qubits n_q will increase the number of values of momentum in each phase-space cell of size $\Delta n = 2\pi/T$, or increase the number of cells, or both. In Ref. [16], it was shown that if T is constant while n_q increases, errors in the QFT may lead to an *exponential* growth of errors with n_q for the second moment $\langle n^2\rangle$ of the probability distribution. In this case, the size of phase space grows exponentially with n_q, but K and effective $\hbar$ are kept fixed. Due to quantum localization, exact wave functions cannot spread beyond a region of size given by the localization length, which remains fixed when n_q increases. Therefore for all values of n_q, the second moment of a distribution initially located at $n_0=N/2$ will saturate with time at a value independent of n_q (full line in Fig. 2) if Eq. (2) is exactly simulated. On the contrary, errors in the QFT lead to small transfer of probabilities to the regions of phase space that are exponentially far away from where the exact wave function is localized. This induces the exponential increase of the second moment with n_q. We confirm here this effect in Fig. 2 for different parameters with more complete set of errors used in this paper, and with simulations up to larger number of qubits.

To be more quantitative, Fig. 3 shows the time scale t_q on which the presence of errors leads to a doubling of the value of the second moment $\langle n^2\rangle$ as a function of n_q and error strength ϵ. In Ref. [16] the formula

$$t_q \approx C_q k^4/(\epsilon^2 n_q 2^{2n_q}) \tag{3}$$

was proposed and checked numerically with up to 13 qubits. It stems from the fact that each imperfect gate operation transfers on average a probability of ϵ^2 equally divided among n_q spurious peaks located at integer powers of 2. Thus, due to imperfections $\langle n^2\rangle \sim n_q \epsilon^2 2^{2n_q} t$ (each time step involves $\sim n_q^2$ gate operations), whereas for the exact wave function $\langle n^2\rangle \approx D^2 \approx 4l^2 \approx k^4/4$. Both expressions become comparable at time t_q given by Eq. (3). Figure 3 confirms this formula by extensive numerical computations, with up to 20 qubits, and for two different values of K. This enables to get the numerical constant $C_q \approx 0.23$.

Although time scale t_q drops exponentially with n_q, there are other observables that show only polynomial sensitivity to errors. A standard quantity used to characterize the global influence of errors is the fidelity defined by the projection of the wave function with errors $\psi_\epsilon(t)$ on the perfect one $\psi_0(t)$: $f(t)=|\langle \psi_\epsilon(t)|\psi_0(t)\rangle|^2$. The dependence of this fidelity on time in presence of errors is shown in Fig. 4, showing that it slowly decreases with t and amplitude of noise ϵ. One can define a time scale t_f such that $f(t_f)=0.5$. Figure 5 presents the variation of t_f with system parameters in two different régimes. It shows that the relation

$$t_f \approx C_f/(\epsilon^2 n_q^2) \tag{4}$$

holds with the numerical constant $C_f \approx 0.35$. Figures 4 and 5 are consistent with a fidelity decay $f(t) \sim \exp(-\Gamma t)$ where $\Gamma \sim \epsilon^2 n_q^2$.

Relation (4) can be understood from the following physical considerations. Each imperfect unitary gate is rotated by a random angle of order ϵ from the exact one. Therefore, a probability of order ϵ^2 is transferred from the exact state at each gate operation. Each time step of map (2) takes $O(n_q^2)$ operations, in the approximation that we have taken where the building of the cosines is supposed exact. This implies that t_f, which is in units of time steps of Eq. (2), should vary

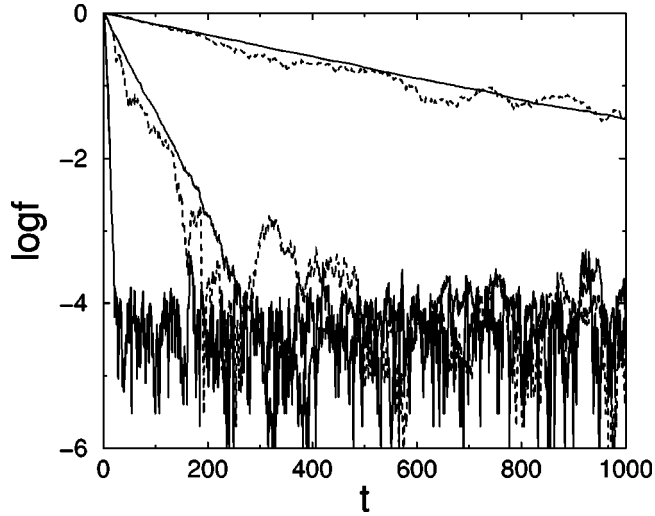


FIG. 4. Evolution of fidelity f with time t. Full curves are for $K=1.3$, $T=2\pi/N$ ($N=2^{n_q}$), $n_q=14$, and from top to bottom $\epsilon=3\times10^{-3}$, $\epsilon=10^{-2}$, $\epsilon=0.03$. The initial state is $|\Psi_0\rangle=|n_0\rangle$ with $n_0=1$. Dashed curves are for $T=0.5$, $K=5$, and $n_q=14$, and from top to bottom $\epsilon=3\times10^{-3}$, $\epsilon=10^{-2}$. The initial state is $|\Psi_0\rangle=|n_0\rangle$ with $n_0=N/2$. The logarithm is decimal.

as $1/(\epsilon^2 n_q^2)$. We expect that if the full algorithm was implemented, with the cosines computed following the procedure explained in Sec. II, a time step of Eq. (2) should take $O(n_q^3)$ operations, and accordingly t_f should vary as $1/(\epsilon^2 n_q^3)$.

The data shown in this section exemplify the sharp contrast in the behavior of the different observables in presence of errors. The fidelity shows only a polynomial decrease with respect to both ϵ and n_q, whereas the second moment of the wave function grows exponentially with n_q, but polynomially with ϵ. The resolution of this apparent paradox is related to the fact that the second moment is sensitive to the *size* of the Hilbert space, which grows exponentially with n_q. Small spurious peaks due to imperfections do not spoil the fidelity, but strongly modify the variance $\langle n^2\rangle$ if they appear very far away from the exact location of the wave function [24].

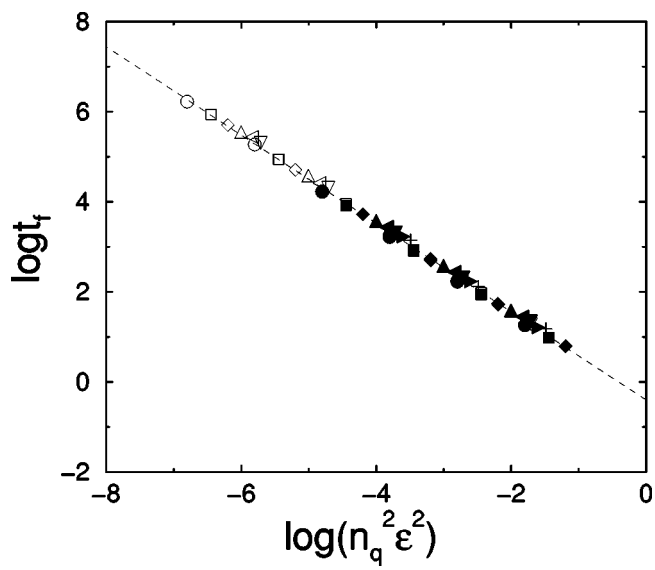


FIG. 5. Dependence of the time scale t_f on system parameters for $n_q=4$ (○), 6 (□), 8 (◇), 10 (△), 12 (◁), 14 (▽), 16 (▷), 18 (+). Here $K=1.3$, $T=2\pi/N$ ($N=2^{n_q}$) (open symbols) or $K=5$, $T=0.5$ (full symbols). The dashed line is the theoretical formula (4) with $C_f=0.35$. The initial state is $|\Psi_0\rangle=|n_0\rangle$, with $n_0=1$ ($K=1.3$) or $n_0=N/2$ ($K=5$). Data are averaged over 10 to 100 realizations of noise. Data for $T=0.5$ and $K=15$ are nearly indistinguishable from $T=0.5$, $K=5$ (not shown). Logarithms are decimal.

IV. WIGNER AND HUSIMI DISTRIBUTIONS

In the preceding section we focused mainly on the case where T (effective $\hbar$) is fixed but the phase-space size grows exponentially with n_q. In contrast, at $T=2\pi/N$ and $N=2^{n_q}$ the system size in classical momentum (number of $2\pi/T$ cells in n) remains fixed when n_q increases. In this way the effective $\hbar$ drops exponentially with n_q and going to larger number of qubits means approaching the classical limit (exponentially fast). Smaller and smaller details of the classical structure will be visible in the quantum wave functions. In this régime, data presented in Figs. 4 and 5 have already shown that the fidelity follows law (4) as in the case $T=$constant. However, the fidelity characterizes in one number the accuracy of the whole wave function, and does not tell how well the local properties are reproduced. To study the local properties of wave functions, one can express it in θ or n representation. However, a very useful representation corresponds to phase-space distributions, such as the Wigner or Husimi distributions. They are especially used in the field of quantum chaos, since such representations permit a direct comparison with classical Hamiltonian mechanics, which takes place in phase space. They also enable to probe the classical/quantum border when $\hbar$ is decreased compare to other parameters of the system. Plotting such quantities in presence of errors allows to probe how local properties of the wave functions are sensitive to imperfections in the quantum algorithm.

An additional motivation to study such phase-space representations stems from the fact that recently an algorithm was proposed [17] that enables to compute the Wigner function on a chosen point in phase space by the use of an ancilla qubit.

For a continuous system with two conjugate variables p and q the Wigner transform [25] of a wave function ψ is defined by

$$W(p,q)=\int \frac{e^{-(i/\hbar)pq'}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi\left(q+\frac{q'}{2}\right)^*\psi\left(q-\frac{q'}{2}\right)dq'. \quad (5)$$

In a discrete system with N-dimensional Hilbert space, one is led to define the Wigner function on a lattice of $2N\times2N$ points (see, e.g., Ref. [26]). In the case of the kicked rotator, the formula becomes

$$W(\theta,n)=\sum_{m=0}^{N-1}\frac{e^{-(2i\pi/N)n(m-\Theta/2)}}{2N}\psi(\Theta-m)^*\psi(m), \quad (6)$$

with $\Theta = N\theta/2\pi$. The Wigner function is always real, but contrary to classical Liouville phase-space distributions it can take negative values. It verifies $\Sigma_i W(\theta_i, n) = |\psi(n)|^2$ and $\Sigma_i W(\theta, n_i) = |\psi(\theta)|^2$.

The Wigner transform has the drawback of being negative or positive. Nevertheless, coarse graining this function over cells of size $\hbar$ gives non-negative values. Such a procedure gives the *Husimi distribution* (see, e.g., Ref. [27]) that corresponds to a Gaussian smoothing of the Wigner function. In the case of the kicked rotator, the Husimi distribution can be computed through

$$h(\theta,n) = \sum_{m=n-N/2}^{n+N/2} \left(\frac{T}{\pi}\right)^{1/4} \frac{\psi(m)}{\sqrt{N}} e^{-(T/2)(m-n)^2} e^{im\theta}, \quad (7)$$

where the Gaussian for simplicity is truncated for values larger than $N/2$, and $\psi(m)$ is the wave function in momentum representation. The Husimi distribution is always non-negative, and allows a direct comparison between classical Liouville density distributions and quantum wave functions.

The Wigner and Husimi distributions of wave functions of the quantum kicked rotator simulated on a quantum computer are shown in Fig. 6 for different level of errors. Both functions have similar patterns, although as expected the Wigner function displays interference structures absent in the Husimi distribution. In the regime of parameters studied, classical invariant curves are still present in phase space and prevent the exact wave function to enter the large elliptical island in the middle. In the presence of moderate level of noise, main structures are still present and distinguishable.

Figure 7 confirms this result, showing the Husimi distribution for larger number of qubits, together with the classical phase-space distribution. The Husimi distributions in phase-space show features mimicking the classical phase space distributions, in accordance with the correspondence principle. Figure 7 (left) shows that when n_q is changed, finer and finer details of the classical structures are visible in the exact quantum wave function, in accordance with the fact that increasing n_q amounts to reduce $\hbar$ and approach the classical limit. The same figure shows that the wave function is spread over a larger domain of phase space as n_q increases. This can be explained by the following effect. In this mixed régime between integrability and strong chaos at $K=1.3$, the invariant classical curves that prevent any transport are no longer present since the last one is destroyed at $K=K_g=0.97\ldots$. But *cantori* are present, which are remnants of the disappeared invariant curves. They have a fractal structure, and a wave packet can cross them only if the holes are large enough. These holes scale as $(K-K_g)^3$ and become comparable with the minimal area scale of the Husimi distribution determined by the effective $\hbar$ given by T. Hence, for $K-K_g \ll 1$, the wave function is prevented to cross the cantorus for $(K-K_g)^3 < T$. Due to that quantum interference prevents the transport via cantori [14,18,28].

The quantum Husimi distributions shown in Figs. 6 and 7 display structures of increasing complexity with larger n_q. Still, with moderate level of noise, the quantum computer is able to reproduce the exact distributions with reasonable accuracy. For larger errors in gate operations, significant probability is present at wrong phase-space locations, and phase-space structures become blurred. The comparison with the effect of classical noise visible in Fig. 7 shows that in this case the quantum errors enable the wave function to enter classically forbidden zones much faster, a fact that will be analyzed in more details in the following section.

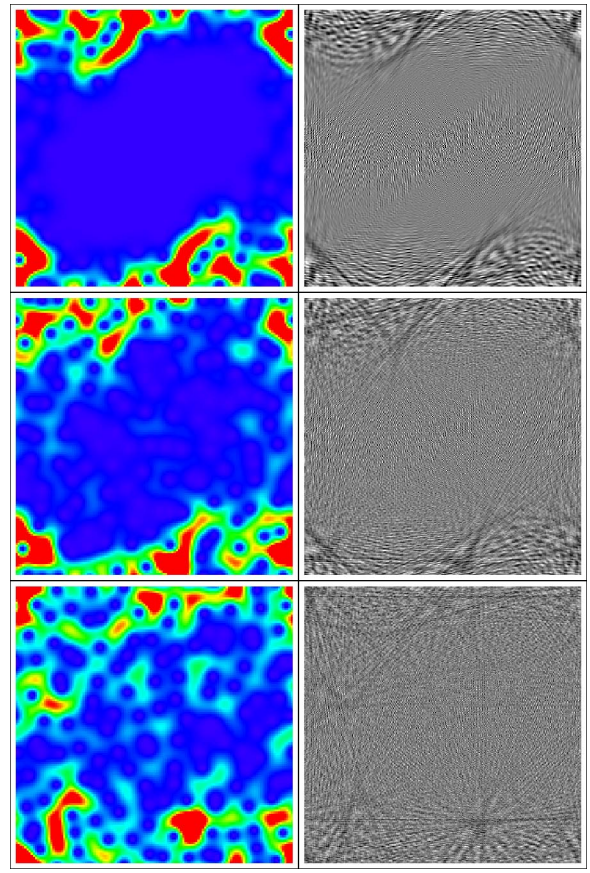


FIG. 6. (Color on line) Plot of Husimi (left) and Wigner (right) distributions at $t=10^3$ for $K=1.3>K_g$, $T=2\pi/N$, $N=2^{n_q}$, and $n_q=7$. The initial state is $|\Psi_0\rangle = |n_0\rangle$, with $n_0=1$. Top, $\epsilon=0$; middle, $\epsilon=0.002$; bottom, $\epsilon=0.004$. Left: color (grayness) represents the intensity level from blue (white) (minimal) to red (black) (maximal). Right: grayness represents the amplitude of the Wigner function, from white (minimal negative value) to black (maximal positive value).

It is interesting to evaluate the effects of noise and imperfections not only on the broad features of the full Wigner function, but also on individual values. In Figs. 8 and 9, the behavior of individual values of the Wigner function in presence of noise in the gates is investigated. Figure 8 shows that the *relative* error (i.e., the error $\langle |W-W_\epsilon| \rangle$ divided by the average individual value of the exact Wigner function $\langle |W| \rangle$) increases slowly with the growth of t and ϵ even in the chaotic zone. Similar results can be observed in the integrable zone and in the localized régime (data not shown). In a more quantitative way, Fig. 9 shows the behavior of time scale t_W when the error on the Wigner function become comparable to its mean value in the régime chosen $[\langle |W(t_W) - W_\epsilon(t_W)| \rangle = \langle |W| \rangle/2]$. In all three cases considered, one obtains

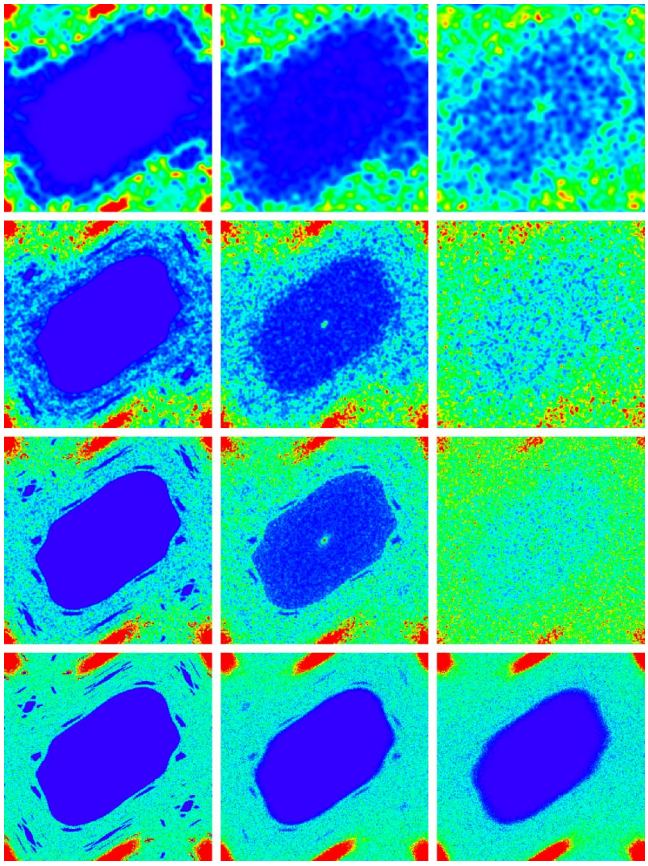


FIG. 7. (Color on line) First three rows: the Husimi distribution at $t=10^3$ for $K=1.3>K_g$ and $T=2\pi/N$, $N=2^{n_q}$; from top to bottom: $n_q=9$, $n_q=12$, $n_q=14$; quantum noise $\epsilon=0$ (left), $\epsilon=0.002$ (center), $\epsilon=0.004$ (right). Bottom row: the classical phase-space distribution at $t=10^3$ with classical noise $\epsilon=0$ (left), $\epsilon=0.002$ (center), $\epsilon=0.004$ (right). For clarity, the distributions are averaged over ten iterations around $t=10^3$. The initial quantum or classical state is $n_0=1$. Color (grayness) represents the intensity level from blue (white) (minimal) to red (black) (maximal).

$$t_W \approx C_W/(n_q^\alpha \epsilon^2), \tag{8}$$

with $\alpha=1$ or $\alpha=1.5$. Thus, individual values of the Wigner function in the kicked rotator model are robust quantities with respect to noise, even in the chaotic régime. These results are interesting also in view of the recent discussion on the effects of decoherence on the Wigner functions [29]. Our results clearly show that in the framework of quantum computation, the errors on the Wigner function are polynomial and not exponential.

As noted previously, a recent algorithm [17] enables to measure the value of the Wigner function of a system of density matrix ρ on a selected point in phase space, with the help of an ancilla qubit a. First, H (Hadamard gate) is applied on a, followed by a controlled-U operation (U is applied to the system to be measured depending on the state of a) and again H is applied on a. Then the expectation value of a is $\langle\sigma^z\rangle=\mathrm{Re}[\mathrm{Tr}(U\rho)]$. The use of a particular operator U, which can be implemented efficiently [17], enables to get $W(p,q)=\langle\sigma^z\rangle/2N$ (where $N=2^{n_q}$).

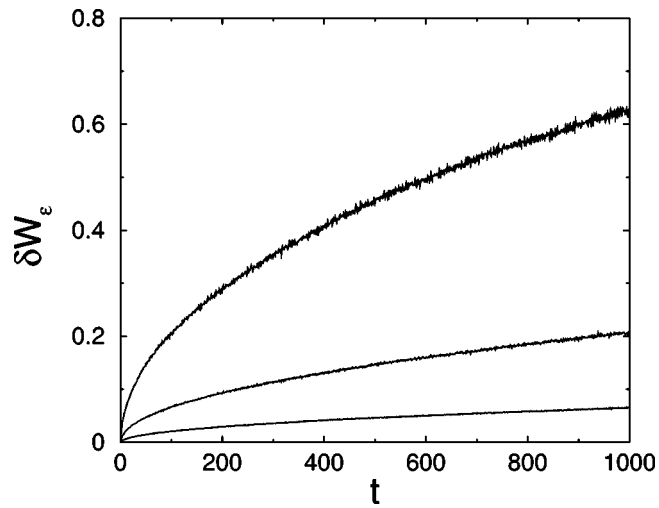


FIG. 8. Relative error on the Wigner function $\delta W_\epsilon=\langle|W-W_\epsilon|\rangle/\langle|W|\rangle$ as a function of time for $K=K_g$, $T=2\pi/N$, $N=2^{n_q}$, and $n_q=10$. The initial state is $|\Psi_0\rangle=|n_0\rangle$, with $n_0=N/2$. From bottom to top quantum noise is $\epsilon=10^{-4}$, $\epsilon=10^{-3.5}$, $\epsilon=10^{-3}$. The Wigner function is averaged over $2N$ values in the chaotic zone. Data are averaged over ten realizations of noise.

However, we should note that even if U can be implemented efficiently, $\langle\sigma^z\rangle$ can be evaluated only by iterating the procedure a number of times to get a good estimate. Therefore, the amplitude of the signal is crucial to make the whole process efficient. Thus, it is interesting to study the amplitude of peaks in the Wigner function, in order to know if strong peaks are present, which can be detected reliably through this method. This can be investigated through a quantity, which we call inverse participation ratio of the Wigner function, in analogy with the inverse participation ratio for wave functions used in quantum chaos and systems with Anderson localization [30]. For a wave function with N projections ψ_i on some basis, the inverse participation ratio $\Sigma|\psi_i|^2/(\Sigma|\psi_i|^4)$ measures the number of significant components in this basis. For the Wigner function, one has the additional sum rules $\Sigma W_i=1$ and $\Sigma W_i^2=1/N$. To define an inverse participation ratio for the Wigner function, we therefore use the formula $\xi=1/(N^2\Sigma W_i^4)$. If N peaks of approximately equal weights $1/N$ are present, then $\xi=N$, whereas N^2 components of equal weights (in absolute value) $1/N^{3/2}$ give $\xi=N^2$. Quantity ξ therefore permits to estimate the number of main components of the Wigner function. Figures 10 and 11 show the scaling of this quantity with n_q for different values of parameters. In all the cases where $T=2\pi/N$ ($N=2^{n_q}$) the ratio ξ/N^2 reaches a saturation value. This implies that asymptotically $\langle\sigma_z\rangle=NW(p,q)\sim 1/\sqrt{N}$, a value that requires N iterations followed by the measurements to be reliably estimated. In this case, the asymptotic gain in number of operations compared to the classical algorithm is only $O(\log(N))$, although the resources needed are exponentially smaller (n_q qubits instead of 2^{n_q} classical registers). This should be contrasted with the case where the number of cells increases (T constant), where Fig. 11 shows that $\xi\sim N$. This gives $\langle\sigma_z\rangle=NW(p,q)\sim 1$, which means that in this regime with localization, any of the $\sim N$ compo-

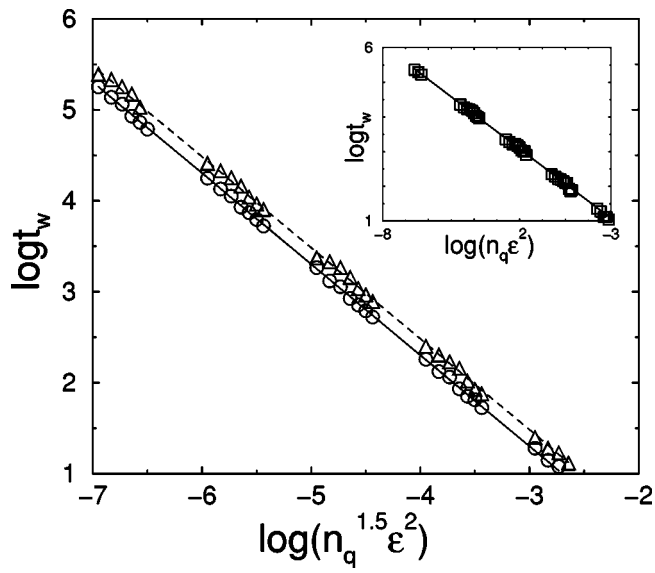


FIG. 9. Dependence of time scale t_W on system parameters for $5 \leqslant n_q \leqslant 11$. Here $K=K_g$, $T=2\pi/N$ ($N=2^{n_q}$). The Wigner function is averaged over $2N$ values in the chaotic zone (○) or in the integrable zone (△). Straight lines are theoretical formula (8) with $\alpha=1.5$ and $C_W=0.02$ (full line) or $C_W=0.03$ (dashed line). The initial state is $|\Psi_0\rangle=|n_0\rangle$, with $n_0=N/2$. Data are averaged over 10 to 1000 realizations of noise. Inset: dependence of the time scale t_W on system parameters for $5 \leqslant n_q \leqslant 14$. Here $T=0.5$ and $K=5$. The Wigner function is averaged over $2N$ values in the localized zone (□). The full line is theoretical formula (8) with $\alpha=1$ and $C_W=0.012$. The initial state is $|\Psi_0\rangle=|n_0\rangle$, with $n_0=N/2$. Data are averaged over 10 to 1000 realizations of noise. Logarithms are decimal.

nents of the Wigner function which are important can be estimated reliably and efficiently through this method (provided one knows beforehand the approximate position of the localized state). The results presented in Figs. 8 and 9 show

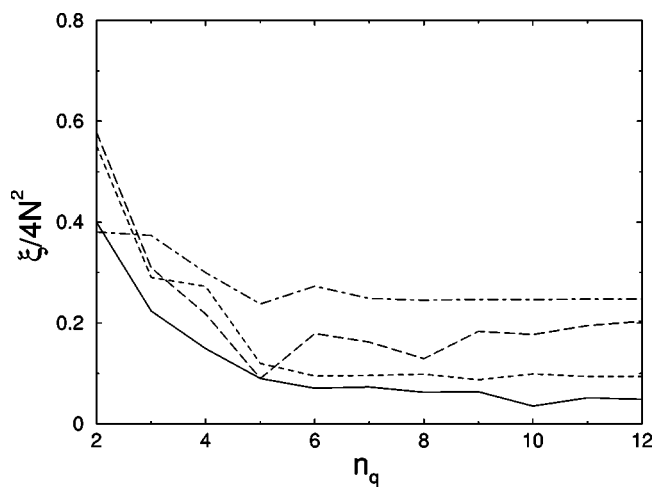


FIG. 10. Dependence of inverse participation ratio ξ of the Wigner function on the number of qubits n_q at $t=10^3$ for $T=2\pi/N$, $N=2^{n_q}$, and $K=0.5$ (full curve), $K=0.9$ (dashed curve), $K=1.3$ (long-dashed curve), $K=2.0$ (dot-dashed curve). Initial state is $|\Psi_0\rangle=|n_0\rangle$, with $n_0=1$, and $\epsilon=0$.

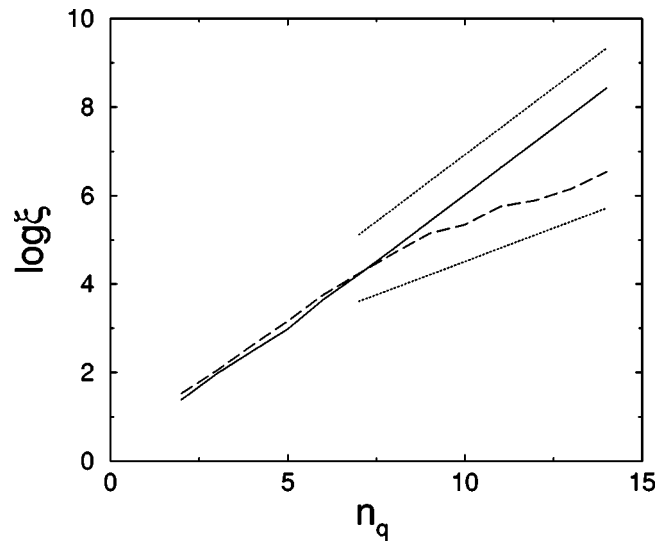


FIG. 11. Dependence of the inverse participation ratio ξ of the Wigner function on the number of qubits n_q at $t=10^3$ for $T=2\pi/N$, $N=2^{n_q}$, and $K=2$ (full line), and $T=0.5$ and $K=5$ (dashed line). Dotted lines show $\xi \propto N^2$ and $\xi \propto N$. The initial state is $|\Psi_0\rangle=|n_0\rangle$, with $n_0=1$ and $\epsilon=0$. The logarithm is decimal.

that despite the different scaling laws of $\langle |W| \rangle$, the relative errors grow only polynomially in all cases considered, thus enabling such measurements of individual values of W to be reliable for moderate amounts of noise.

V. QUANTUM TUNNELING THROUGH INVARIANT CURVES

In the preceding section, it was shown that the classical and quantum errors affect the dynamics in a rather different way. This difference is particularly striking in the régime where classical invariant curves are present (integrable or mixed systems, which correspond to moderate values of K here, as in Fig. 7). Such invariant curves cannot be crossed classically, and only quantum tunneling can transfer probability inside integrable islands from chaotic regions. Whereas small classical errors enable to cross only neighboring invariant curves, small quantum errors may lead to long-distance "jumps" of probability deep into integrable island (see Fig. 7, last column).

To study the effects of errors on quantum tunneling, we show in Fig. 12 the dependence of probability of the Husimi distribution $h(\theta,n)$ inside the classically forbidden region on time t. The quantity $I(t)=\int_D h(\theta,n)d\theta dn$, where D is the domain enclosed by the circle in Fig. 10 (inset), shows a linear growth with t. This can be understood by a physical argument similar to the one justifying Eq. (4). Indeed, imperfect gates transfer on average a probability of order ϵ^2 from the exact wave function to wrong phase-space positions. However, not all gates will transfer probability inside D but only a subset of them. This predicts that $I(t) \sim n_q^{\alpha} \epsilon^2 t$. Data from Figs. 12 and 13 and additional data (not shown) confirm this prediction, with $\alpha \approx 1.3$.

To exemplify the effect of quantum errors, Fig. 13 shows $I(t)$ at fixed time t as a function of number of qubits n_q for

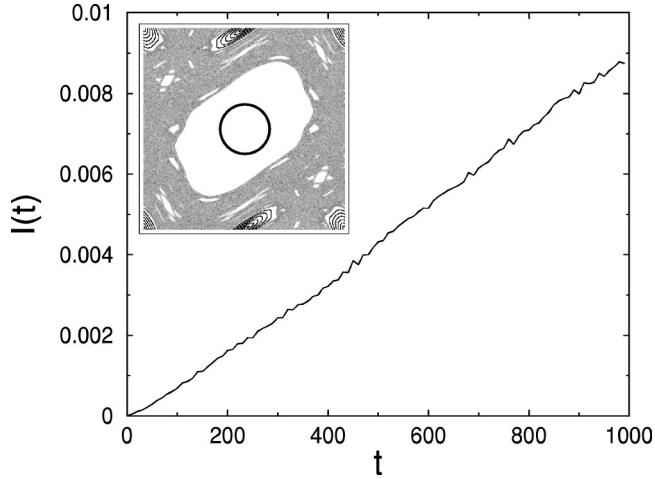


FIG. 12. Dependence of probability I of the Husimi distribution inside the circle (see text and inset) on time t for $\epsilon=10^{-3}$ and $n_q=14$ at $K=1.3$ and $T=2\pi/N$ ($N=2^{n_q}$). The initial state is $|\Psi_0\rangle=|n_0\rangle$, with $n_0=1$. Inset: The position of 100 points initially at $n_0=1$ after 10^4 iterations of classical map (1) and location of circular domain D (see text).

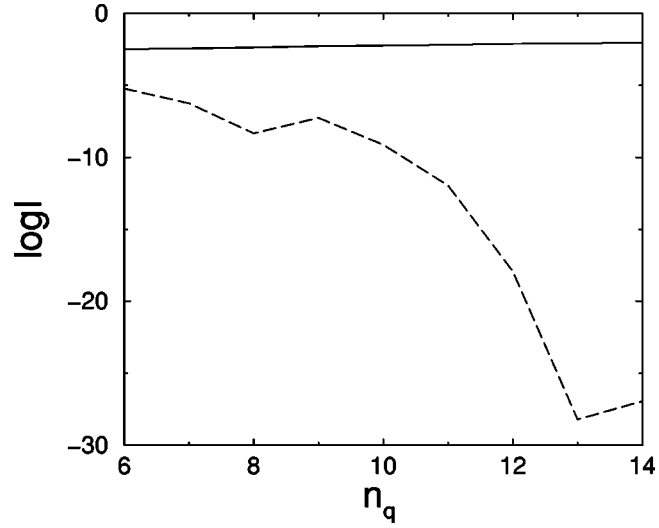


FIG. 13. Dependence of probability I of the Husimi distribution inside the circle (see text and Fig. 12) on n_q for $K=1.3$ and $T=2\pi/N$, $N=2^{n_q}$, $\epsilon=3\times10^{-3}$ (solid curve), and $\epsilon=0$ (dashed curve). Data are averaged over 100 iterations around $t=10^3$. The initial state is $|\Psi_0\rangle=|n_0\rangle$ with $n_0=1$. The logarithm is decimal.

zero and nonzero noise in the gates. In the case of zero noise, there is an exponential *decrease* with n_q. Indeed, the only process that allows to enter the island for the wave packet is quantum tunneling. In general, the probability of such a transition scales like $\exp(-S/\hbar)$, where S is a classical action. Increase of n_q amounts to decrease the effective $\hbar$ and leads to the exponential drop of I obtained numerically at $\epsilon=0$. In sharp contrast, the presence of imperfections in the gates ($\epsilon>0$) leads to direct jumps inside the island that gives an *increase* of I with n_q according to the estimate of the previous paragraph. Thus, for this specific process, the effect of noise in the gates results in a qualitative change of the dependence of tunneling probability I on n_q.

VI. CONCLUSION

The results presented in this paper show that it is possible to simulate efficiently the quantum kicked rotator on a quantum computer. For the quantum algorithm simulating the dynamics of kicked rotator, we investigated the effects of gate errors and showed that certain quantities such as fidelity and the Wigner and Husimi distributions are sufficiently robust against noise in the gates. Thus, for small amplitude of noise these quantities can be computed reliably without application of quantum error corrections. At the same time we found that there exist other characteristics, e.g., variance of probability distribution and tunneling probability inside stability islands, which are very sensitive to errors in quantum gates. In addition, the study of the Wigner function shows that individual values of this function are robust with respect to quantum errors and can be reliably estimated. However, the computation of the Wigner function at specific points meets certain readout problems in deep quasiclassical regime where generally a large number of measurements is required.

On the basis of obtained results we believe that the quantum algorithms simulating quantum chaotic maps will provide important grounds for testing the accuracy of the next generation of experimental implementations of quantum computers.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank the IDRIS in Orsay and CalMiP in Toulouse for access to their supercomputers. This work was supported in part by the NSA and ARDA under ARO Contract No. DAAD19-01-1-0553, by the EC RTN Contract No. HPRN-CT-2000-0156, and by the project EDIQIP of the IST-FET program of the EC.

[1] R.P. Feynman, Found. Phys. **16**, 507 (1986).
[2] A. Eckert and R. Josza, Rev. Mod. Phys. **68**, 733 (1996).
[3] A. Steane, Rep. Prog. Phys. **61**, 117 (1998).
[4] M.A. Nielsen and I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
[5] P.W. Shor, in *Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, edited by S. Goldwasser (IEEE Computer Society, Los Alamitos, CA, 1994), p. 124.
[6] L.K. Grover, Phys. Rev. Lett. **79**, 325 (1997).
[7] L.M.K. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C.S. Yannoni, M.H. Sherwood, and I.L. Chuang, Nature (London) **414**, 883 (2001).
[8] Y.S. Weinstein, S. Lloyd, J. Emerson, and D.G. Cory, Phys. Rev. Lett. **89**, 157902 (2002).
[9] S. Lloyd, Science **273**, 1073 (1996); D.S. Abrams and S. Lloyd, Phys. Rev. Lett. **79**, 2586 (1997).
[10] A. Sørensen and K. Mølmer, Phys. Rev. Lett. **83**, 2274 (1999).

[11] R. Schack, Phys. Rev. A **57**, 1634 (1998).
[12] B. Georgeot and D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **86**, 2890 (2001).
[13] G. Benenti, G. Casati, S. Montangero, and D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **87**, 227901 (2001).
[14] B.V. Chirikov, in *Les Houches Lecture Series*, edited by M.-J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin (North-Holland, Amsterdam, 1991), Vol. 52.
[15] B.V. Chirikov, Phys. Rep. **52**, 263 (1979); A. Lichtenberg and M. Lieberman, *Regular and Chaotic Dynamics* (Springer, New York, 1992).
[16] P.H. Song and D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **86**, 2162 (2001).
[17] C. Miquel, J.P. Paz, M. Saraceno, E. Knill, R. Laflamme, and C. Negrevergne, Nature (London) **418**, 59 (2002).
[18] D.L. Shepelyansky, Physica D **28**, 103 (1987).
[19] F.M. Izrailev, Phys. Rep. **129**, 299 (1990).
[20] S. Fishman, D.R. Grempel, and R.E. Prange, Phys. Rev. Lett. **49**, 509 (1982).
[21] G. Casati, I. Guarneri, and D.L. Shepelyansky, IEEE J. Quantum Electron. **24**, 1420 (1988); P.M. Koch and K.A.H. van Leeuwen, Phys. Rep. **255**, 289 (1995).
[22] F.L. Moore, J.C. Robinson, C.F. Bharucha, B. Sundaram, and M.G. Raizen, Phys. Rev. Lett. **75**, 4598 (1995); H. Ammann, R. Gray, I. Shvarchuck, and N. Christensen, *ibid.* **80**, 4111 (1998).
[23] In Ref. [16] the noise amplitude was also $\pi\epsilon$.
[24] We note that the second moment does not grow exponentially with time at fixed n_q, but linearly. However, the coefficient of this linear growth depends exponentially on n_q.
[25] E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932); M.V. Berry, Philos. Trans. R. Soc. London **287**, 237 (1977).
[26] C. Miquel, J.P. Paz, and M. Saraceno, Phys. Rev. A **65**, 062309 (2002).
[27] S.-J. Chang and K.-J. Shi, Phys. Rev. A **34**, 7 (1986).
[28] T. Geisel, G. Radons, and J. Rubner, Phys. Rev. Lett. **57**, 2883 (1986); R.S. MacKay and J.D. Meiss, Phys. Rev. A **37**, 4702 (1988).
[29] W.H. Zurek, Nature (London) **412**, 712 (2001); A. Jordan and M. Srednicki, e-print quant-ph/0112139.
[30] A. MacKinnon and B. Kramer, Phys. Rev. Lett. **47**, 1546 (1981).

Chapitre 4

Simulation du Harper pulsé

4.1 Le modèle de Harper

4.1.1 Modèle de Harper

L'équation de Harper a été introduite en 1955 comme modèle approché pour des électrons en champ cristallin bidimensionnel plongés dans un champ magnétique [50]. Plusieurs approximations importantes sont nécessaires pour l'établir. Tout d'abord, on se restreint à l'étude d'une seule bande de Bloch, par exemple celle qui contient l'énergie de Fermi et dans laquelle se trouvent les électrons de conduction. L'approximation suivante consiste à postuler une forme d'énergie de bande $E(\vec{k})$ dérivant d'un couplage fort ($\vec{k}$ est le quasi-moment défini modulo le réseau réciproque). La périodicité de $E(\vec{k})$ en $\vec{k}$ permet alors de développer l'énergie en série de Fourier. Pour un réseau carré de maille a, et en se restreignant au premier ordre, on obtient

$$E(\vec{k}) = K\cos(k_x a) + L\cos(k_y a)$$

Ce réseau cristallin bidimensionnel est alors plongé dans un champ magnétique uniforme perpendiculaire B (dérivant par exemple du potentiel-vecteur $\vec{A} = (0, Bx, 0)$). Pour tenir compte de ce champ magnétique, on effectue la substitution de Peierls : on remplace $\hbar\vec{k}$ dans l'expression de l'énergie ci-dessus par $\vec{\Pi} = \vec{p} - e\vec{A}$, pour obtenir un opérateur que l'on traite comme un hamiltonien effectif.

$$H = K\cos\left(\frac{\Pi_x}{\hbar}a\right) + L\cos\left(\frac{\Pi_y}{\hbar}a\right)$$

En présence du champ magnétique, Π_x et Π_y ne commutent plus

$$\begin{aligned}
[\Pi_x, \Pi_y] &= -[p_x, eA_y] + [p_y, eA_x] \\
&= i\hbar e\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) \\
&= i\hbar e B
\end{aligned}$$

On peut réécrire le hamiltonien en fonction de $\kappa_x = \frac{\Pi_x}{\hbar} a$ et $\kappa_y = \frac{\Pi_y}{\hbar} a$

$$H = K \cos \kappa_x + L \cos \kappa_y \tag{4.1}$$

avec la relation de commutation

$$[\kappa_x, \kappa_y] = i \frac{e}{\hbar} B a^2 = 2\pi i \alpha$$

La quantité sans dimension $\alpha = \frac{\phi}{\phi_0}$ représente simplement le rapport entre le flux magnétique à travers une maille du réseau $\phi = Ba^2$ et le quantum de flux $\phi_0 = \frac{h}{e}$.

La relation de commutation entre κ_x et κ_y est formellement équivalente à la relation de commutation canonique $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar = 2\pi i \alpha$ avec $\alpha = \frac{\hbar}{2\pi}$. On peut donc transposer (4.1) à un système à une dimension, avec un hamiltonien fonction des deux variables conjuguées $\hat{q}$ et $\hat{p}$. On obtient ainsi le hamiltonien de Harper [50, 7, 8, 33, 40, 97]

$$H = K \cos \hat{q} + L \cos \hat{p} \tag{4.2}$$

La forme du spectre de (4.2) dépend de la rationalité de α. Pour $\alpha = \frac{r}{s}$, le spectre est composé de s bandes, mais pour α irrationnel, les valeurs propres forment un ensemble de Cantor. Si l'on trace la structure de bande en fonction de α, on obtient la figure bien connue du papillon de Hofstadter [52] (fig. 4.1).

La longueur de maille typique d'un réseau cristallin est de l'ordre de 0,2 nm. Comme $\alpha = \frac{eBa^2}{h}$, la réalisation expérimentale du papillon de Hofstadter requièrerait un champ de 10^5 T, ce qui est bien au-delà des limites techniques actuelles. Cependant, en augmentant la taille de la maille grâce à des super-réseaux artificiels, il est possible d'observer les effets de la commensurabilité sur la magnétoconductance [79].

4.1.2 Modèle de Harper pulsé

Classiquement, le hamiltonien de Harper est toujours intégrable

$$H = K \cos q + L \cos p$$

Afin d'introduire un peu de diversité et une once de chaos, on définit le modèle de Harper pulsé de manière analogue au rotateur pulsé

$$H = L \cos p + K \cos q \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(t - m)$$

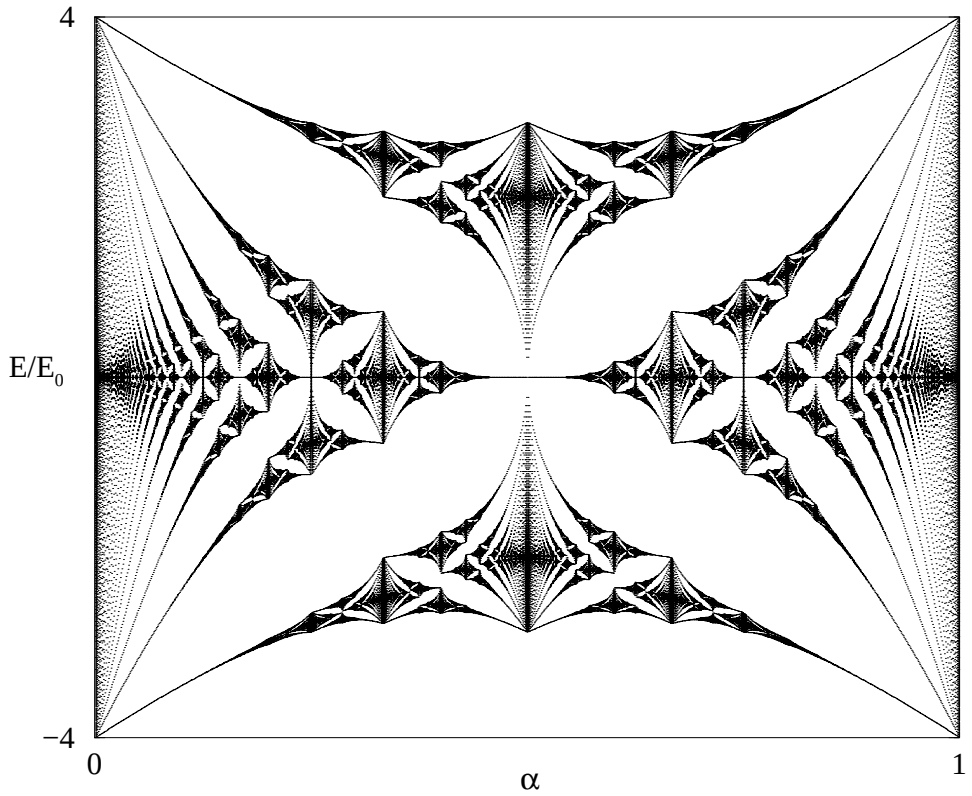


FIG. 4.1 – Papillon de Hofstadter pour un réseau symétrique en x et y, avec $K = L = 2E_0$ (figure obtenue par diagonalisation de (4.3) avec $K = L = 10^{-3}$).

En ne considérant l'état du système qu'aux temps t entiers, on obtient l'application correspondante

$$\begin{cases} \bar{p} &= p + K \sin q \\ \bar{q} &= q - L \sin \bar{p} \end{cases}$$

De même que pour le rotateur pulsé quantique, la quantification du modèle de Harper donne un opérateur d'évolution qui s'écrit comme le produit de deux opérateurs fonctions respectivement de $\hat{q}$ et de $\hat{p}$

$$\hat{U} = \exp\left(-i\frac{L}{\hbar}\cos\hat{p}\right)\exp\left(-i\frac{K}{\hbar}\cos\hat{q}\right) \tag{4.3}$$

Un certain nombre de nouvelles propriétés peuvent être remarquées. Tout d'abord, pour des faibles valeurs de $K = L$, l'espace des phases est majoritairement intégrable, à l'exception d'une mince couche chaotique qui entoure les îlots principaux. Ce réseau stochastique ("stochastic web") traverse l'espace des phases de part en part, et est à l'origine de phénomènes de transport

particuliers. Ce type de réseau a été très étudié dans la littérature. Pour des valeurs plus fortes de K et L, on assiste à des transitions entre états localisés et états délocalisés selon les valeurs des paramètres [4, 5, 6, 14, 56, 61, 67, 76]. Cependant, contrairement au modèle avec transition d'Anderson étudié dans [74], les états propres ne possèdent pas tous le même seuil de délocalisation. Dès lors, on peut avoir pour certains régimes de paramètres des états "mixtes" qui sont des superpositions d'états localisés et d'états délocalisés. La délocalisation du système global se fait donc de manière très graduelle contrairement au modèle d'Anderson, et également au rotateur pulsé où il n'y a pas de transition. Dans la phase délocalisée, le système peut présenter une diffusion normale ou anormale suivant la valeur des paramètres. Les transitions entre ces types de diffusion ne sont pas encore complètement élucidées à l'heure actuelle.

4.2 Résultats sur le modèle de Harper pulsé

Comme nous venons de le voir, le modèle de Harper pulsé présente de nombreuses propriétés originales. Sa forme est représentative d'un grand nombre de modèles d'applications pulsées. Pour cette raison, il est possible de le simuler grâce à la même méthode que celle employée pour le rotateur pulsé quantique [43]. Cependant celle-ci est longue et coûteuse en qubits. Existe-t-il d'autres algorithmes plus économes, en acceptant éventuellement des solutions approchés ? Ici aussi se pose le problème de l'extraction d'informations à partir de la fonction d'onde finale : quelles quantités peut-on mesurer précisément, et avec quel gain par rapport à une simulation classique ? Enfin, le modèle d'erreur étudié ici diffère de celui du chapitre précédent ; on suppose maintenant la présence d'imperfections statiques internes. Les interactions entre qubits, qui sont nécessaires pour construire les portes à deux qubits, ne pourront vraisemblablement pas être éliminées totalement lorsque celles-ci ne sont plus désirées. Ces imperfections statiques ne résultent pas d'une interaction avec l'extérieur, mais simplement d'un couplage résiduel entre les qubits de l'ordinateur quantique. Leurs effets peuvent être importants, et de nature différente de ceux provoqués par les erreurs dynamiques.

Ce type d'imperfection a déjà été étudié par Georgeot et Shepelyansky [42, 41]. Au-dessus d'un certain seuil critique de couplage interqubits, le chaos quantique apparaît, conduisant à l'ergodicité des états propres de l'ordinateur. Dans ce régime, les qubits ne sont plus indépendants et l'opérabilité de l'ordinateur est fortement compromise. Cependant, le seuil de chaos décroît seulement linéairement avec le nombre de qubits, ce qui ménage une plage de paramètres relativement large dans laquelle le bon fonctionnement est possible. Dans cette étude, il s'agissait toutefois d'un ordinateur au repos, ne faisant pas tourner d'algorithme. Il est intéressant de connaître

l'effet des erreurs sur un ordinateur en fonctionnement typique, d'autant plus que le modèle simulé ici possède un comportement très riche. De plus, des résultats précédents sur d'autres modèles suggèrent que ce type d'imperfection statique a des conséquences plus graves qu'un bruit unitaire dans les portes quantiques.

On suppose que les portes quantiques sont appliquées instantanément, mais qu'entre deux portes successives le système évolue pendant τ_g suivant l'hamiltonien

$$H_e = \sum_{i=0}^{n_q-1} (\Delta_0 + \delta_i) Z_i + \sum_{i=0}^{n_q-1} J_i X_i X_{i+1}$$

où la deuxième somme porte sur toutes les paires de qubits voisins sur une chaîne circulaire. La différence d'énergie entre les deux états d'un qubit est égale à la valeur moyenne Δ_0, à laquelle s'ajoute une quantité aléatoire δ_i, comprise entre $-\frac{\delta}{2}$ et $\frac{\delta}{2}$. De même, les couplages J_i (répartis aléatoirement et uniformément dans l'intervalle $\left[-\frac{J}{2}, \frac{J}{2}\right]$) représentent l'interaction statique résiduelle entre les qubits. Contrairement aux erreurs dynamiques, les imperfections statiques sont supposées être caractéristiques de l'ordinateur quantique considéré, donc le jeu de δ_i et J_i ne varie pas au cours du calcul. Ce modèle d'erreur est la version la plus simple de l'hamiltonien d'Heisenberg qui permette d'obtenir des effets non triviaux.

Comme Δ_0 est constant et identique pour tous les qubits, son effet est simple et peut être compensé facilement. L'hamiltonien effectif utilisé pour simuler les erreurs est alors

$$H_e = \sum_{i=0}^{n_q-1} \delta_i Z_i + \sum_{i=0}^{n_q-1} J_i X_i X_{i+1}$$

De plus, on choisit $\delta = J$; l'amplitude des erreurs est alors gouvernée par le paramètre $\varepsilon = \delta\tau_g = J\tau_g$.

Dans la publication II ci-après [63], trois algorithmes quantiques différents sont présentés et analysés, permettant de simuler efficacement l'opérateur d'évolution du modèle de Harper pulsé avec des précisions et des besoins en ressources différents. En plus de la méthode exacte déjà mentionnée dans le cas du rotateur pulsé quantique, nous avons aussi exploré une autre approche où la dynamique n'est simulée qu'approximativement, mais où aucun qubit supplémentaire n'est requis. Deux méthodes de ce type ont été étudiées, l'une mettant en jeu un découpage en temps de l'opérateur d'évolution, l'autre l'approximant avec des polynômes.

Selon les paramètres choisis, le système est presque intégrable, localisé, ou partiellement délocalisé. Dans chaque cas, nous identifions les quantités

concernant le transport ou le spectre qui peuvent être obtenues plus efficacement sur un ordinateur quantique que sur un ordinateur classique. Dans la plupart des cas, un gain polynomial est obtenu, quadratique ou moins suivant le régime considéré.

Nous présentons également les effets des imperfections statiques sur les quantités choisies, et montrons que selon le jeu de paramètres des comportement très différents sont observés. Quelques quantités, comme la distribution de Husimi, la longueur de localisation ou le spectre, peuvent être obtenues de manière fiable avec des niveaux modérés d'imperfections, tandis que d'autres sont exponentiellement sensibles à leur amplitude. En particulier, le seuil d'imperfection pour la délocalisation devient exponentiellement faible dans le régime partiellement délocalisé. Ceci signifie que contrairement à l'étude [74] sur la transition d'Anderson, le point de transition calculé en présence d'imperfections se déplace exponentiellement vite lorsque l'on augmente l'amplitude des erreurs. Nos résultats montrent qu'un comportement intéressant peut être observé avec seulement 7 ou 8 qubits, et peut être mesuré de manière fiable en présence d'un taux modéré d'imperfections internes.

4.3 Publication II

Quantum computation of a complex system : The kicked Harper model
B. Lévi and B. Georgeot
Phys. Rev. E. **70**, 056218 (2004)
quant-ph/0409028

Quantum computation of a complex system: The kicked Harper model

B. Lévi and B. Georgeot
Laboratoire de Physique Théorique, UMR 5152 du CNRS, Université Paul Sabatier, F-31062 Toulouse Cedex 4, France
(Received 11 June 2004; published 22 November 2004)

The simulation of complex quantum systems on a quantum computer is studied, taking the kicked Harper model as an example. This well-studied system has a rich variety of dynamical behavior depending on parameters, displays interesting phenomena such as fractal spectra, mixed phase space, dynamical localization, anomalous diffusion, or partial delocalization, and can describe electrons in a magnetic field. Three different quantum algorithms are presented and analyzed, enabling us to simulate efficiently the evolution operator of this system with different precision using different resources. Depending on the parameters chosen, the system is near integrable, localized, or partially delocalized. In each case we identify transport or spectral quantities which can be obtained more efficiently on a quantum computer than on a classical one. In most cases, a polynomial gain compared to classical algorithms is obtained, which can be quadratic or less depending on the parameter regime. We also present the effects of static imperfections on the quantities selected and show that depending on the regime of parameters, very different behaviors are observed. Some quantities can be obtained reliably with moderate levels of imperfection even for large number of qubits, whereas others are exponentially sensitive to the number of qubits. In particular, the imperfection threshold for delocalization becomes exponentially small in the partially delocalized regime. Our results show that interesting behavior can be observed with as little as 7–8 qubits and can be reliably measured in presence of moderate levels of internal imperfections.

DOI: 10.1103/PhysRevE.70.056218 PACS number(s): 05.45.Mt, 03.67.Lx, 72.15.Rn

I. INTRODUCTION

In the past few years, the field of quantum information [1] has attracted more and more attention in the scientific community. Among the most fascinating promises of this domain is the possibility of building a quantum computer. Such a quantum processor can use the superposition principle and the interferences of quantum mechanics to perform new types of algorithms which can be much more efficient than classical algorithms. Celebrated examples are Shor's algorithm which factors large integers exponentially faster than any known classical algorithm [2] and Grover's algorithm which searches unstructured lists quadratically faster than classical methods [3]. Another type of quantum algorithms concerns the simulation of physical systems. Examples include many-body quantum systems [4], classical and quantum spin systems [5], and classical dynamical systems [6,7]. Algorithms implementing quantum maps are especially interesting, since the systems simulated have simple equations of motion but can display very complex behaviors. Their simplicity enables one to simulate them with a small number of qubits. For example, it is possible to simulate efficiently the baker map [8] (experimental implementation with the NMR technique has already been performed [9]), the quantum kicked rotator [10,11], the sawtooth map [12], or the tent map [13]. In such algorithms, it is important to determine which physical quantities can be obtained accurately through measurement on the quantum computer and what is the total algorithmic complexity of the whole process. It is equally important to determine the effects of errors in the computation to assess the efficiency of the algorithm on a realistic quantum computer.

In the present paper, we will study in detail an important example of quantum map—namely, the kicked Harper model. The Hamiltonian of this system has a simple form, yet displays many interesting physical features not present in quantum maps previously studied in this context, such as fractal spectra, stochastic web, anomalous diffusion, or coexistence of localized and delocalized states. It was introduced in the context of solid-state physics (motion of electrons in presence of magnetic field) and has been the subject of many studies. Using this model as a test ground, we will present three different ways of simulating the quantum map on a quantum computer, two of them inspired by previous works, and compare their efficiency. We will then present examples of physical quantities which can be obtained on a quantum computer. It turns out that depending on the parameters of the system, at least polynomial speedup compared to classical algorithms can be obtained for different quantities. Numerical simulations and analytical estimations will also evaluate the effects of imperfections in the quantum computer on the estimation of these quantities.

II. HARPER AND KICKED HARPER MODELS

The Harper model was introduced in 1955 [14] to describe the motion of electrons in a two-dimensional lattice in presence of a magnetic field. Its Hamiltonian reads

$$H_0(I,\theta) = \cos(I) + \cos(\theta). \tag{1}$$

This Hamiltonian has been the subject of many studies (see, for example, [15–19]), but its dynamics is somewhat restricted by the fact that it describes an integrable system. A generalization of this model was introduced some time ago; it is called the kicked Harper model:

 ©2004 The American Physical Society

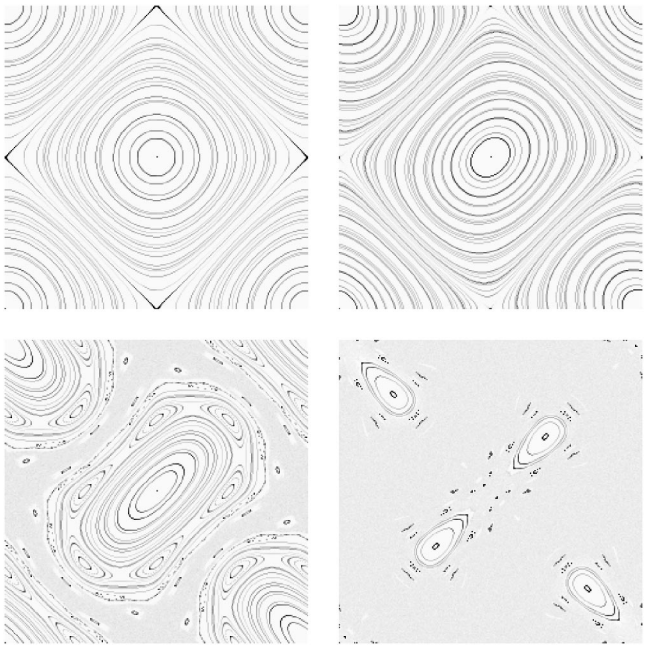


FIG. 1. Phase space of the classical kicked Harper model: $K=L\to 0$ (Harper model) (upper left), $K=L=0.5$ (upper right), $K=L=1.5$ (lower left), and $K=L=2.5$ (lower right) (10 000 iterations of 256 classical orbits). One cell of size $2\pi\times 2\pi$ is shown, the phase space being periodic.

$$H(I,\theta,t) = L\cos(I) + K\cos(\theta)\sum_m \delta(t-m), \tag{2}$$

where m runs through all integers values and K,L are constants. This Hamiltonian reduces to Eq. (1) in the limit $K=L\to 0$, but has a more complex dynamics depending on the parameters. Its dynamics between two kicks can be integrated to yield the map

$$\overline{I} = I + K\sin\theta,\quad \overline{\theta} = \theta - L\sin\overline{I}. \tag{3}$$

As in the case of the kicked rotator, there is a classical periodicity in both θ and I. Thus the phase space is composed of cells of size $2\pi\times 2\pi$ where the same structures repeat themselves.

This map (3) has been related to the motion of electrons in a perpendicular magnetic and electric fields and also to the problem of stochastic heating of a plasma in a magnetic field.

The quantization of Eq. (2) yields a periodic Hamiltonian which after integration over one period yields a unitary evolution operator acting on the wave function ψ:

$$\overline{\psi} = \hat{U}\psi = e^{-iL\cos(\hbar\hat{n})/\hbar}e^{-iK\cos(\hat{\theta})/\hbar}\psi, \tag{4}$$

where $\hat{n}=-iQ\partial/\partial\theta$ and $\psi(\theta+2Q\pi)=\psi(\theta)$.

This system has been the subject of many studies in the past few years, which focused on localization properties [20–27], tunneling properties [28,29], etc.

In the limit $K=L\to 0$ the system is classically integrable. For small K,L, chaos begins to appear around separatrices and spreads over larger and larger phase space areas as K,L increase (see Fig. 1). In the regime of small K,L, classical transport from cell to cell is possible only in the very small chaotic zones around separatrices. For $K=L$, this network of thin chaotic zones surrounding large islands is called the "stochastic web" (see Fig. 2). For intermediate values of K,L, the phase space is mixed, with integrable islands separated by large chaotic zones. For larger K,L, classical chaos is present in most of the phase space (cf. Fig. 1), and a typical trajectory will diffuse through the system. The quantum dynamics is related to these classical properties, but shows some striking differences. In the limit $K=L\to 0$, the system is integrable and wave functions are concentrated around classical tori, but complexity manifests itself in the spectrum of the Hamiltonian, which is fractal ("Hofstadter butterfly"). For small K,L the motion of a quantum wave packet is dominated by the presence of classical invariant curves; the wave packet can spread in between these curves or cross them by quantum tunneling. For larger K,L, in the regime of classical diffusion, as in the kicked rotator, a phenomenon similar to Anderson localization of electrons in disordered solids takes place. Through this phenomenon, called dynamical localization, a wave packet started at some value of momentum n will first spread, but contrary to classical trajectories this spreading will saturate. This corresponds to the fact that eigenfunctions $\psi_a(n)$ of $\hat{U}$ in Eq. (4) in momentum space (they are called Floquet eigenfunctions since they correspond to the action of the evolution operator during one period) are exponentially localized. Their envelopes obey the law $\psi_a(n)\sim\exp(-|n-m|/l)/\sqrt{l}$ where m marks the center of the eigenstate and l is the localization length. This phenomenon is especially visible for moderate values of K, where all eigenfunctions are localized. For larger values of K, the system undergoes a transition: some eigenfunctions are still localized, but more and more are delocalized (ergodic) and spread over the whole system. This coexistence of localized and delocalized states gives rise to specific physical properties. Indeed, it is very different from what happens in the

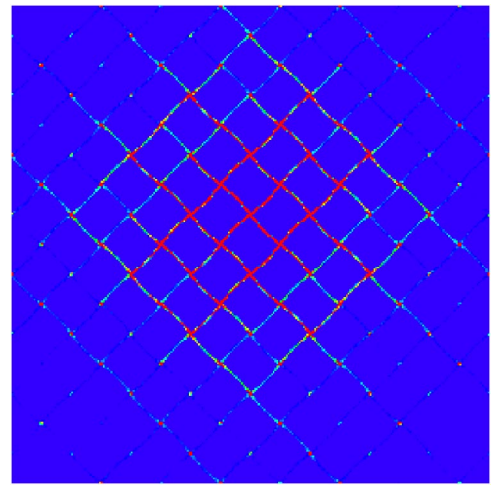


FIG. 2. (Color online) Example of stochastic web in the kicked Harper model. Here $K=L=0.5$, phase space is 8×8 cells of size $2\pi\times 2\pi$, and the figure shows positions after $t=1000$ iterations of 10^6 classical trajectories initially distributed according to a Gaussian centered half a cell above the center with standard deviation $\sqrt{2\pi/2^{25}}\approx 0.0004$. Color (grayness) shows the density of points, from red (gray) (maximal value) to blue (black) (minimal value).

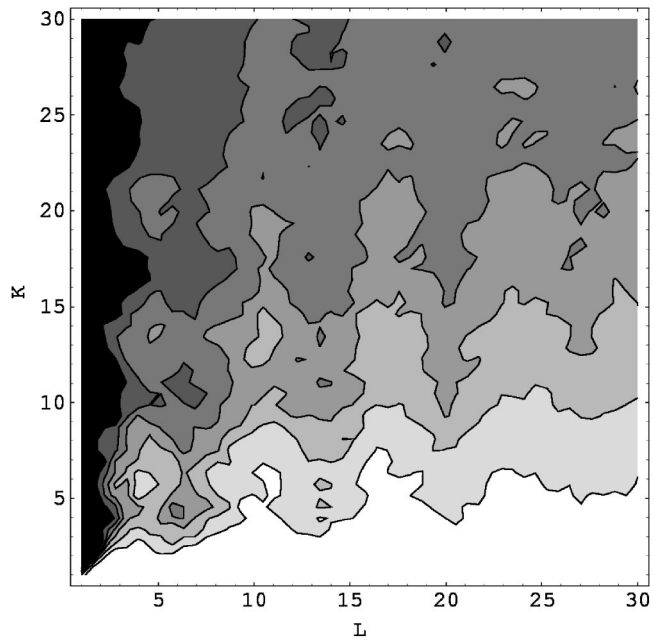


FIG. 3. Map of delocalization in the (K,L) plane. Grayness represents the inverse participation ratio $\xi=1/\Sigma_n|\psi(n)|^4$ (IPR), a measure of delocalization of states, from $\xi=1$ (state localized on one momentum state) to $\xi=N_H$ (totally delocalized state) (N_H is the dimension of the Hilbert space). Contour lines correspond to values of ξ ranging from 32 to 192 by increments of 32, $N_H=2^9$, $\hbar/2\pi=(13-\sqrt{5})/82$ (actual value is the nearest fraction with denominator 2^9). White corresponds to lowest values, black to maximal values of ξ. Each ξ value is obtained by averaging over all eigenstates of the evolution operator $\hat{U}$ of Eq. (4).

kicked rotator model, where usually all states are localized once classical chaos is present (see, for example, [11]) or in the Anderson transition (investigated in [30]) where the transition separates a regime where all eigenstates are localized from a regime where all are delocalized. In this regime of partial delocalization, an initial wave packet will spread, but a certain fraction of the total probability will remain localized. In addition, the diffusion of probability in momentum space has been shown numerically to be anomalous, with an exponent depending on the parameter values [17,22,23]. These properties are summarized by the phase diagram of Fig. 3. Different quantities can be obtained in these different regimes with the help of a quantum computer.

The phase space can be decomposed in cells of size $2\pi\times 2\pi$. Its global topology depends on boundary conditions. For a system of size N_H, if the phase space is closed with periodic boundary conditions, with, respectively, Q and P cells in the θ and n directions, then $\hbar=2\pi PQ/N_H$. Therefore, if one wants to keep $\hbar$ constant, the product PQ should be chosen such that PQ/N_H is the closest rational to $\hbar/(2\pi)$. For most of the results of this paper, the phase space will be a cylinder closed in the θ direction $(Q=1)$ and extended in the direction of momentum, and transport properties will be studied in the momentum direction, as in the kicked rotator. In this case $\hbar/(2\pi)$ was set to $1/\{6+1/[(\sqrt{5}-1)/2]\}=(13-\sqrt{5})/82$ as in [23] to avoid unwanted arithmetical effects. The choice of a constant $\hbar$ implies that changing the number of qubits leads to increasing the size of phase space (number of cells) in the n direction. Only for the study of the stochastic web present at small $K=L$ (Sec. IV A) will the phase space be extended in both directions and its size (number of cells) fixed. In this case increasing the number of qubits leads to smaller and smaller $\hbar$.

III. SIMULATING THE TIME EVOLUTION: THREE POSSIBLE ALGORITHMS

The evolution operator (4) is composed of two transformations which are diagonal in, respectively, the momentum and position representations. This form is general for a family of kicked maps such as the kicked rotator, sawtooth map, and others. On a classical computer, the fastest way to implement such an evolution operator on a wave function of N_H components is to use the fast Fourier transform (FFT) algorithm to shift back and forth between the n and θ representations and to implement each operator by direct multiplication in the basis where it is diagonal. In this way, $O(N_H \log N_H)$ classical operations are needed to implement Eq. (4) on a N_H-dimensional vector. On a quantum computer, it is possible to use the quantum Fourier transform (QFT) to shift between momentum and position representations, using $O((\log N_H)^2)$ quantum gates. In each representation, one has then to implement the multiplication by a phase, $e^{-iL\cos(\hbar\hat{n})/\hbar}$ and $e^{-iK\cos(\hat{\theta})/\hbar}$.

In the following we will envision three different strategies to implement these diagonal operators: (i) exact computation using additional registers to hold the values of the cosines, (ii) decomposition into a sequence of simpler operators which are good approximations during short time slices, and (iii) direct computation, the cosine function being approximated by a (Chebyshev) polynomial.

The first one is in principle exact, but requires extra registers, and was already proposed in [10]. The second one has some similarities with the one explained in [30] for another system. The third one was not used in the context of quantum algorithms to the best of our knowledge, although the method is well known in computer science (see, for example, [31] for a recent use of this method to simulate many-spin systems on a classical computer). We note that an approximate algorithm to simulate the kicked Harper for long time was used in [32]; however, in that paper the aim of the authors was different, since they only wanted to construct efficiently a good approximation of the ground-state wave function in order to use it for generating phase-space distributions of other systems, and it is not clear that the method works for other purposes. We also note that the simulation of the Harper model on optical lattices was envisioned in [33]. In the following discussions, we denote by n_q the total number of qubits including ancilla and workspace qubits, and $N=2^{n_q}$ is the total dimension of the Hilbert space of the quantum computer. We denote n_r with $n_r\leqslant n_q$, the number of qubits describing the Hilbert space of the kicked Harper model [i.e., the wave function evolved through Eq. (4) is N_H dimensional with $N_H=2^{n_r}$], and n_g is the number of elementary quantum gates used for one iteration of the quantum map (4).

A. Exact algorithm

This approach is similar to the one taken in [10] for the quantum simulation of the kicked rotator. In each representation, the value of the cosines is built on a separate register and then transferred to the phase of the wave function by appropriate gates.

If one starts with a N_H-dimensional wave function $|\psi\rangle = \Sigma_{i=0}^{N_H-1} a_i|\theta_i\rangle$ in the θ representation, with $N_H=2^{n_r}$, then the first step is to perform

$$\sum_{i=0}^{N_H-1} a_i|\theta_i\rangle|0\rangle \to \sum_{i=0}^{N_H-1} a_i|\theta_i\rangle|\cos\theta_i\rangle.$$

To this aim, the $2n_r$ values $\cos(2\pi/2^j)$ and $\sin(2\pi/2^j)$, for $j=1,\ldots,n_r$, are first precomputed classically with precision 2^{-n_p} with, for example, $n_p=2n_r$ using a recursive method based on Moivre's formula; then, since $\theta_i=\Sigma_{j=1}^{n_r}\beta_{ij}2\pi/2^j$ with $\beta_{ij}=0$ or 1, one has

$$\exp(i\theta_i) = \prod_{j=1}^{n_r} \exp(i\beta_{ij}2\pi/2^j)$$
$$= \prod_{j=1}^{n_r} [\cos(\beta_{ij}2\pi/2^j) + i\sin(\beta_{ij}2\pi/2^j)].$$

This enables to compute $|\cos\theta_i\rangle$ for each θ_i in n_r multiplications by $\exp(i2\pi/2^j)$ conditioned by the values of β_{ij}, needing in total $O(n_r^3)$ quantum gates.

Then once the binary decomposition of $\cos\theta_i$ is present on the second register, conditional application of the n_r one-qubit gates

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(-iK2^{-j}/\hbar) \end{pmatrix}$$

yields the state

$$\sum_{i=0}^{N_H-1} a_i \exp[-iK\cos(\theta_i)/\hbar]|\theta_i\rangle|\cos\theta_i\rangle.$$

Then the cosines in the last register are erased by running backward the sequence of gates that constructed them, and one ends up with the state

$$\sum_{i=0}^{N_H-1} a_i \exp[-iK\cos(\theta_i)/\hbar]|\theta_i\rangle|0\rangle,$$

which is the result of the action of the unitary operator $\exp[-iK\cos(\hat{\theta})/\hbar]$ on $|\psi\rangle$.

Then the use of the QFT which needs $O(n_r^2)$ quantum gates shifts the wave function to the momentum representation, and exactly the same technique as above enables us to implement the operator $\exp[-iL\cos(\hbar\hat{n})/\hbar]$ in $O(n_r^3)$ quantum gates. A second QFT enables us to go back to the θ representation.

The whole process implements one iteration of the evolution operator $\hat{U}$ in $O(n_r^3)$ operations, with exponential precision. This algorithm is therefore efficient, and precision can be increased exponentially at a cost of polynomial number of operations. On the other hand, the drawback of this approach is the need of several extra registers (one holding the values of the cosines, plus others for the workspace of the computation) and a relatively large number of gates. In the present status of experimental implementations of quantum computers, both the number of qubits and the number of gates that can be applied are very expensive resources. In the following, we will therefore expose two alternative strategies to implement $\hat{U}$, which are much more economical in the use of resources, but involve additional approximations.

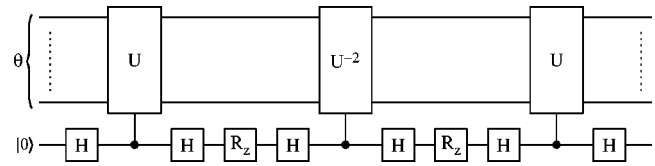


FIG. 4. Gate sequence for slices algorithm. R_z are Z rotations of angle $-\alpha$.

B. Slice method

This technique enables to compute the operator $\hat{U}$ of Eq. (4) without explicitly calculating the cosines. It approximates $\hat{U}$ by a sequence of many operators, each of them being easier to compute. It can be viewed as "slicing" the operator into elementary operators.

As above, we start with a N_H-dimensional wave function $|\psi\rangle=\Sigma_{i=0}^{N_H-1}a_i|\theta_i\rangle$ in the θ representation, with $N_H=2^{n_r}$. In general, suppose we want to perform the operator

$$U_k = e^{-ik\cos(p\hat{\theta})}.$$

In the θ representation, this operator is diagonal, so we just have to multiply each state by the phase $e^{-ik\cos(p\theta)}$. First, we write θ as

$$\theta = \frac{2\pi}{N_H}\sum_{i=0}^{n_r-1} d_i 2^i, \tag{5}$$

where the d_i's are the binary expansion of θ and $N_H=2^{n_r}$. If $p=2^a m$ with m odd, then

$$p\theta = \frac{2\pi m}{N_H}\left(\sum_{i=0}^{n_r-a-1} d_i 2^{i+a}\right) \bmod 2\pi.$$

Thus U_k is equivalent to applying

$$e^{-ik\cos(m\theta)}$$

on the n_r-a first qubits. In the following, we will suppose that p is odd ($a=0$) for the sake of simplicity.

With the help of one ancilla qubit, let us perform the following sequence, where all gates are applied to the ancilla (initially set to $|0\rangle$), except for C_U which is the operator U applied on the principal register, controlled by the ancilla (the gate sequence is also displayed in Fig. 4):

$$M(\alpha,U) = HC_U He^{i(\alpha/2)\sigma_z} HC_{U^{-2}} He^{i(\alpha/2)\sigma_z} HC_U H.$$

This product is equal to

$$M(\alpha,U) = \cos^2\frac{\alpha}{2} - \sin^2\frac{\alpha}{2}\frac{U^2+U^{-2}}{2} + i\sin\alpha\frac{U+U^{-1}}{2}\sigma_z - i\sin^2\frac{\alpha}{2}\frac{U^2-U^{-2}}{2i}\sigma_x = 1 + i\alpha\frac{U+U^{-1}}{2}\sigma_z + O(\alpha^2) \text{ for } \alpha \ll 1.$$

If we take $U=e^{ip\theta}$,

$$M(\alpha,U) = 1 + i\alpha\cos(p\theta)\sigma_z + O(\alpha^2),$$

since the ancilla qubit is in the $|0\rangle$ state,

$$M(\alpha,U) \approx e^{i\alpha\cos(p\hat{\theta})}.$$

The kick operator can then be performed by $n_s \gg 1$ applications of $M(\alpha,U)$:

$$U_k \approx M(\alpha,U)^{n_s} \text{ with } \alpha = \frac{-k}{n_s}.$$

A more accurate expansion can be obtained by symmetrizing $M(\alpha,U)$:

$$\widetilde{M}(\alpha,U) = M\left(\frac{\alpha}{2},U\right)M\left(\frac{\alpha}{2},U^{-1}\right) = 1 + i\alpha\frac{U+U^{-1}}{2}\sigma_z - \frac{\alpha^2}{2}\left(\frac{U+U^{-1}}{2}\right)^2 + O(\alpha^3).$$

Thus $U_k \approx \widetilde{M}(\alpha,U)^{n_s}$ up to order 2 in α.

In this way, once a certain precision has been fixed, n_s can be chosen such that the error is small enough.

If we apply this strategy to the kicked Harper model, the method is therefore to first compute $\exp[-iK\cos(\hat{\theta})/\hbar]$ through the technique above ($k=K/\hbar, p=1$), then use a QFT to shift to the momentum representation. In the n representation, the operator $\exp[-iL\cos(\hbar\hat{n})/\hbar]$ can be cast in the form above for $\hbar=2\pi m/N_H$, with $p\to m$, $k\to L/\hbar$, and $\theta \to 2\pi n/N_H$. The use of a QFT then shifts back the wave function to the θ representation.

The evolution of a N_H-dimensional wave function with $N_H=2^{n_r}$ through one time slice is efficient, costing $O(\log N_H)$ quantum operations. Indeed, for n_s slices, one diagonal operator in Eq. (4) is implemented in $4+2(n_r-a)+(n_s-1)[7+2(n_r-a)]$ elementary gates, with $a \leqslant n_r$. The number of slices fixes the precision. If one requires a fixed precision, independent of the number of qubits, then the whole method is efficient, iterating $\hat{U}$ in $O((\log N_H)^2)$ operations (the most costly operation asymptotically being the QFT). However, if one requires the precision to increase with N_H, then the method becomes less efficient. This algorithm is quite economical in qubits, since to simulate a wave function on a Hilbert space of dimension 2^{n_r}, only $n_q=n_r+1$ qubits are needed. One should note that for large number of slices, their computation dominate the computation time although asymptotically the QFT dominates. In all numerical simulations we performed, the slice contribution was indeed dominant.

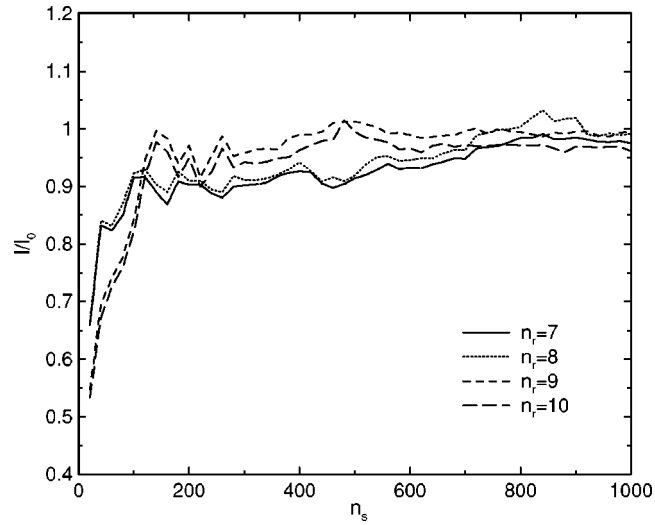


FIG. 5. Localization length computed with the slice method over exact localization length l_0 as a function of number of slices per iteration. Localization length is extracted after $t=1000$ iterations. Initial state is $|\psi_0\rangle=|0\rangle$, with $K=1$, $L=5$, $\hbar/2\pi=(13-\sqrt{5})/82$ (actual value is the nearest fraction with denominator 2^{n_r} with $n_r=n_q-1$).

To precise the accuracy of the method, we show examples of the localization length in the localized regime as a function of number of gates in Fig. 5. The convergence with increasing number of slices (gates) is clearly seen, although for a small number of gates oscillations are present. Data from $n_r=7,8$ and $n_r=9,10$ are close to each other due to the structure of the algorithm: indeed, $\hbar/(2\pi)$ is approximated by its closer approximants m/N_H, and incrementing n_r by 1 changes every other time the value of $\hbar$. No major modification is seen in the numerical data for increasing n_r, indicating that in this regime n_s does not need to be drastically changed with n_r.

One may think that the spectrum is a much more sensitive quantity than the localization length. In Fig. 6, we display the convergence for the spectrum of $\hat{U}$ for K and L small, in a parameter regime close to the fractal "butterfly" visible for the unkicked Harper model (see Fig. 24). The quantities displayed correspond to eigenphases E_a where $\hat{U}|\psi_a\rangle = \exp(iE_a)|\psi_a\rangle$ for some $|\psi_a\rangle$. The matrix of the operator $\hat{U}$ of Eq. (4) is built by evolving through the slice method explained above the basis vectors and then diagonalized. Convergence can be achieved with a few hundred time slices. Due to numerical limitations, we cannot present data for different values of n_r, but we do not expect any drastic modification.

In the subsequent sections, numerical simulations of this algorithm in presence of errors will be performed. To keep the computation time reasonable, we chose to use the slice method with 2×40 slices per iteration for transport properties (Sec. IV). Although the localization length is not exactly the correct one, the system is still localized and enables to study the variation of transport properties in presence of errors and imperfections. For computation of the spectrum (Sec. V), we used 2×100 slices per iteration.

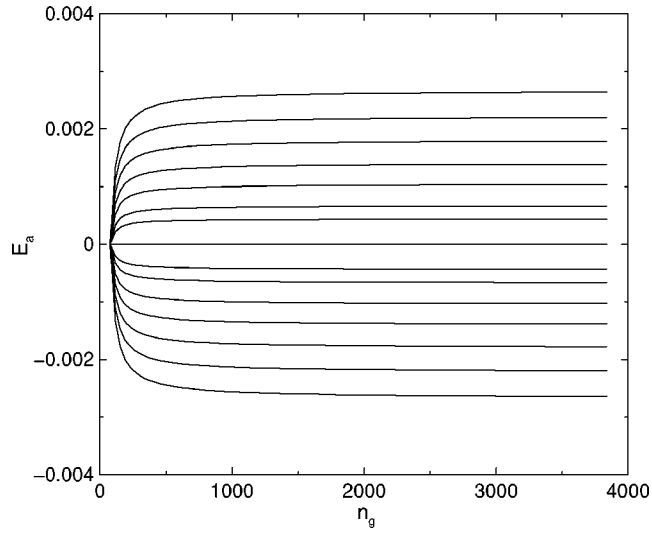


FIG. 6. Eigenphases of Eq. (4) as a function of number of gates with the slice method: only 16 values are shown. Here $n_r=6$ ($n_q=n_r+1$), $\hbar=2\pi/2^6$, $K=L=10^{-3}$.

C. Chebyshev polynomials

In this approach, one uses the QFT as in the preceding methods to shift back and forth between θ and n representations. In each representation, the relevant operator is implemented by using a polynomial approximation of the cosines. Since polynomials can be implemented directly through controlled operations, this avoids the use of additional registers. A commonly used polynomial approximation rests on Chebyshev polynomials.

Chebyshev polynomials (see, for example, [34]) are defined by the recurrence relation

$$T_0(x) = 1,$$

$$T_1(x) = x,$$

$$T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x) \quad \text{for } n \geqslant 2.$$

They are bounded by -1 and 1 on $[-1,1]$, with their extrema smoothly distributed over this interval. If $f(x)$ is an arbitrary function on $[-1,1]$ and we define, for $j=0,\ldots,M-1$,

$$c_j = \frac{2}{M}\sum_{k=0}^{M-1} f\left[\cos\left(\frac{\pi\left(k+\frac{1}{2}\right)}{M}\right)\right]\cos\left(\frac{\pi j\left(k+\frac{1}{2}\right)}{M}\right),$$

then, for large M,

$$\sum_{j=0}^{M-1} c_j T_j(x) - \frac{1}{2}c_0$$

is a very good approximation of $f(x)$ on $[-1,1]$.

If we truncate this formula to order m,

$$\sum_{j=0}^{m} c_j T_j(x) - \frac{1}{2}c_0,$$

then the error is bounded by $\Sigma_{j=m+1}^{M-1}|c_k|$ and smoothly spread over $[-1,1]$. Practically, the c_k's are always rapidly decreasing, so the error term is dominated by $|c_{m+1}|$ and we can choose a small m while still keeping a good polynomial approximation of $f(x)$.

Let $P(x)$ be a Chebyshev polynomial approximation of $\cos[\pi(x+1)]$. If one wants to perform the operator $U_k = e^{-ik\cos(p\hat{\theta})}$ on a N_H-dimensional vector with $N_H=2^{n_r}$ as in the preceding subsection, then, for $p=1$,

$$U_k \approx e^{-ikP(\hat{\theta}/\pi-1)}.$$

U_k can be decomposed as a product of operators of the form $A_r(\beta)=e^{i\beta\hat{\theta}^r}$.

From Eq. (5),

$$e^{i\beta\theta^r} = \prod_{j_1\cdots j_r} e^{i\beta(2\pi/N_H)^r d_{j_1}\cdots d_{j_r} 2^{j_1+\cdots+j_r}}.$$

Since the d_j's are binary digits, $d_{j_1}\cdots d_{j_r}$ is equal to 0 unless all terms are equal to 1. If we denote by $C_{j_1\cdots j_r}(\phi)$ the multicontrolled phase gate, which apply the phase $\exp(i\phi)$ conditionally on the control qubits $j_1\cdots j_r$ (if an index is redundant, then it is counted only once),

$$A_r(\beta) = \prod_{j_1\cdots j_r} C_{j_1\cdots j_r}\left(\beta\left(\frac{2\pi}{N_H}\right)^r 2^{j_1+\cdots+j_r}\right).$$

Since all these gates commute and since all the gates used for the construction of A_r are also present in the development of $A_{r'}$ for $r' \geqslant r$, then all the terms of the polynomial P can be applied at the same time as the term of highest order by merging similar gates.

If $p \neq 1$, then p is split into $p=2^a m$ with m odd, as in Sec. III B. The even part 2^a is dealt with by applying U_k only on the n_r-a first qubits. We then multiply the register by m before applying the cosine kick. Since m is coprime with the dimension of the Hilbert space $N_H=2^{n_r}$, this operation is unitary and can be performed without any additional qubit (for example with the circuit in Fig. 7).

If we choose a Chebyshev polynomial approximation of degree d, then the complexity of the algorithm is $O(n_r^d)$. This method is economical in qubits, and the precision of the approximation is easy to control. On the other hand, the complexity increases with the precision, and this can become prohibitive for very precise simulations. It is nevertheless quite efficient for fixed precision computations, as can be inferred from the fact that it is actually the method used in classical computers to evaluate functions.

In our numerical simulations, we found that a Chebyshev polynomial of degree 6 was enough to get a very good approximation of the wave function. This demands a much larger number of gates than the slice method and scales badly with n_q, in n_q^6 (here $n_q=n_r$ since there are no ancilla or workspace qubit). However, some of the control-phase gates have very small phases and are physically irrelevant. We can then choose a precision threshold and simply drop all the gates

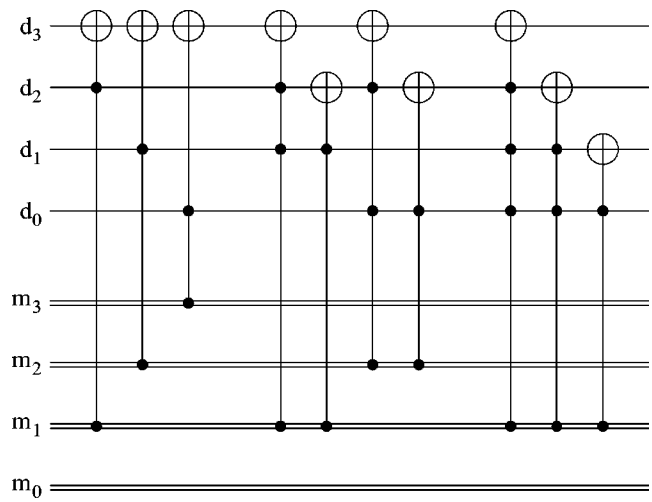


FIG. 7. Circuit for multiplying the quantum register θ (simple lines) by an odd classical number m (double lines).

with phases below this threshold. The distribution of the phases of the gates computing the Chebyshev approximant of degree 6 is displayed in the inset of Fig. 8.

This method of approximation is investigated in Figs. 8 and 9. The localization length as a function of number of gates is displayed in Fig. 8, for the same system parameters as in Fig. 5. In Fig. 9, we display the convergence for the spectrum, in the same regime as in Fig. 6.

In both cases, the convergence is good for maximal number of gates, showing that the polynomial of degree 6 is indeed a good enough approximation in this regime of parameters. A good accuracy is achieved for a lower number of gates, implying that dropping the gates with the smallest

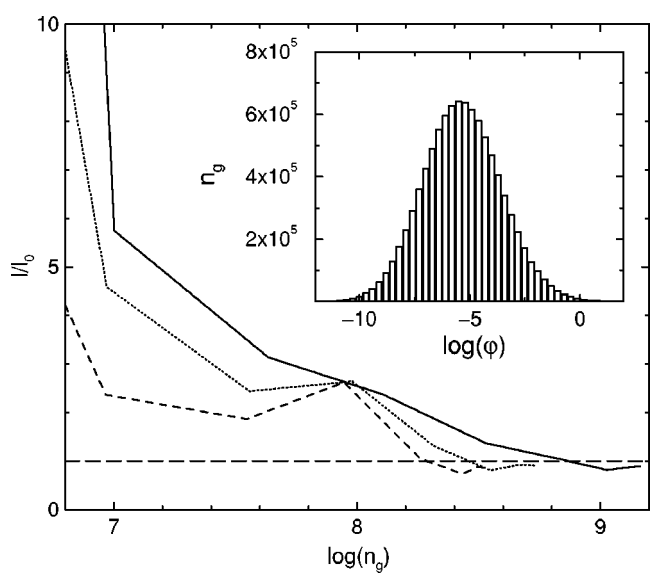


FIG. 8. Localization length computed with the Chebyshev method over exact localization length l_0 as a function of number of gates. System parameters are the same as in Fig. 5, with $n_r=7$ (dashed line), $n_r=8$ (dotted line), and $n_r=9$ (solid line) ($n_q=n_r$). Dashed horizontal line is $l=l_0$. Chebyshev polynomial of degree 6 is taken, keeping gates with the largest phases. Inset: number of gates as a function of their phase. Logarithms are decimal.

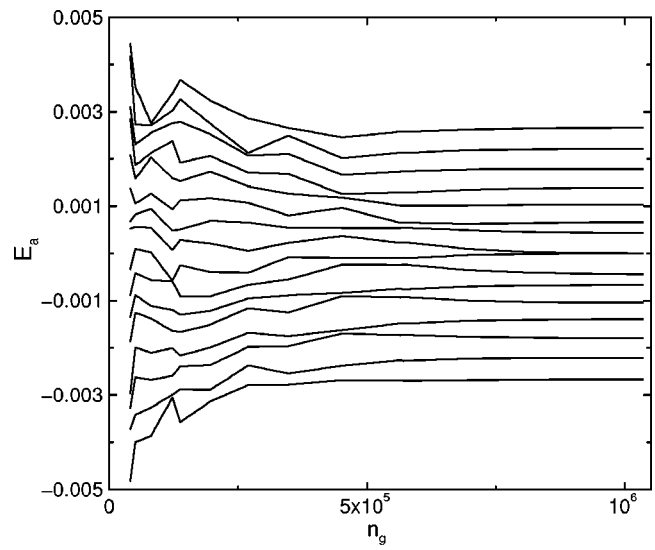


FIG. 9. Eigenphases of Eq. (4) as a function of number of gates with the Chebyshev method. System is the same as in Fig. 6. Chebyshev polynomial of degree 6 is taken, keeping gates with the largest phases. An overall phase factor (global motion of eigenvalues) has been eliminated.

phases can be an effective way to shorten the computation keeping a reasonable accuracy. Still, the data presented lead to the conclusion that even with the elimination of a large number of gates the method is clearly costlier in running time than the slice method to achieve similar precision.

IV. TRANSPORT PROPERTIES: MEASUREMENT AND IMPERFECTION EFFECTS

The three methods exposed above enable to simulate efficiently the effects of the evolution operator $\hat{U}$ of the kicked Harper model on a wave function. This produces the wave function at a given time. An important question concerns which quantities can be obtained through quantum measurement of the registers and if the whole process including measurement is more efficient than classical computation. A separate question but also related to practical efficiency of these algorithms is their stability with respect to errors and imperfections while running them on a realistic quantum computer.

In this section, we will focus on the transport properties of the wave function. We recall that for the kicked Harper model, for small K,L diffusion can only takes place on the small chaotic layer of the stochastic web. Then for larger K,L there is a regime of parameters where all eigenstates are localized and another regime where localized and delocalized eigenstates coexist (see Fig. 3). In these different parameter regimes, we will show that quantities measuring localization properties and diffusion can be obtained on a quantum computer more efficiently than on a classical device, although the gain is usually polynomial. We will then test the resilience to errors of these quantities obtained through the quantum algorithms, in particular through large-scale numerical computations. The error model we chose

corresponds to static internal imperfections. Indeed, physical realization of a quantum computer will never be perfect, and some amount of disorder will always be present. In particular, interactions between qubits, which are needed to build the two-qubit gates, cannot in general be totally eliminated when they are not needed. These static imperfections are not linked to interaction with the outside world; they have been shown to give important effects, which can be larger than the effects of noisy gates [12,35,36]. To model such errors, between each gate we require that the system evolves through the Hamiltonian

$$H_1 = \sum_i (\Delta_0 + \delta_i)\sigma_i^z + \sum_i J_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x, \tag{6}$$

where the σ_i are the Pauli matrices for the qubit i and the second sum runs over nearest-neighbor qubit pairs on a circular chain. The energy spacing between the two states of a qubit is represented by its average value Δ_0 plus a detuning δ_i randomly and uniformly distributed in the interval $[-\delta/2, \delta/2]$. The detuning parameter δ gives the width of the distribution near the average value Δ_0 and may vary from 0 to Δ_0. The couplings J_i represent the residual static interaction between qubits and are chosen randomly and uniformly distributed in the interval $[-J/2, J/2]$. We make the approximation that this Hamiltonian (6) acts during a time τ_g between each gate which is taken as instantaneous. Throughout the paper, we take in general one single rescaled parameter ε which describes the amplitude of these static errors, with $\varepsilon = \delta\tau_g = J\tau_g$. To probe the transport properties of the kicked Harper model on a quantum computer, we chose to set $\hbar$ constant; in this way, changing the number of qubits is equivalent to changing the size of phase space (adding one qubit doubles the size of the phase space). The only exception is in the first following subsection (near-integrable regime), where the phase-space volume is constant and $\hbar$ varies with the number of qubits. Throughout this section, effects of imperfections will be assessed using the slice method to implement Eq. (4). Therefore the presence of one ancilla qubit implies that $n_q = n_r + 1$ in all of this section.

A. Near-integrable regime: Stochastic web

For K, L very small, the classical system is near integrable: quantum transport is dominated by the presence of invariant curves. Motion from cell to cell can take place only by tunneling effect or by moving in the small chaotic zone around separatrices. In the case $K=L$, this small layer forms a "stochastic web" (see Fig. 2) which extends in both θ and n directions. A wave packet started in this region will slowly diffuse along this web. This process is best seen using quantum phase-space distributions, which allow direct comparisons between classical distributions such as the ones in Fig. 1 and 2 and quantum wave functions.

The Wigner function [37,38] is an example of such quantum phase space distribution. However, it can take negative values, and only a smoothing over cells of area $\hbar$ gives nonnegative values. The use of a Gaussian smoothing leads to the Husimi distribution (see, e.g., [39]) which in our case is defined by the formula

$$h(\theta,n) = \sqrt{\frac{2P}{QN_H^3}} \times \left| \sum_{m=n-N_H/2+1}^{n+N_H/2} \psi(m) e^{-(\pi P/N_H Q)(m-n)^2} e^{2i\pi m\Theta/N_H} \right|^2, \tag{7}$$

where the Gaussian for simplicity is truncated for values larger than $N_H/2$, $\psi(m)$ is the wave function in momentum representation, P (Q) is the number of cells in the momentum (position) direction, $N_H = 2^{n_r}$ is the dimension of the Hilbert space, and $\Theta = N_H\theta/(2\pi Q)$. We note that methods to compute phase-space distributions on a quantum computer were discussed in [13,32,40].

In Fig. 10 we show the spreading of a wave packet along the stochastic web for different numbers of qubits and different strengths of imperfections. In this picture, the size of the classical phase space is fixed, and the number of qubits gives the value of $\hbar$. A diffusion process is observed, which can be related both to the classical diffusion on the stochastic web (Fig. 2) and to the effect of quantum tunneling from cells to cells. The diffusion constant is seen from Fig. 10 to depend on $\hbar$; it also depends on K, L (data not shown) and is clearly different from the classical diffusion constant (compare the different times in Figs. 2 and 10). In this near-integrable regime, the tunneling process is quite complicated and was recently studied in [29]. In the same figure, one can see that with moderate levels of imperfections the exact Husimi distribution is well reproduced by the algorithm.

To probe transport properties in this regime, one can start a wave packet in the stochastic web and let it evolve. After a certain number of time steps, the diffusion constant can be obtained from measurement of the wave function. As the number of components of the wave function or of the Husimi distribution becomes exponentially large as n_r increases, the best way is to use coarse-grained measurements: measuring only the first qubits adds up the amplitudes squared of many neighboring components and limits the number of measurements to a fixed value. This can be done to the wave function directly in the momentum or position representation or to the Husimi function provided all the values are kept on a quantum register. For example, the Husimi-like function developed in [13] can be obtained by modified Fourier transform from the wave function and allows the use of coarse-grained measurements. If one starts a wave packet on the stochastic web, it will diffuse according to the law $\langle s(t)^2 \rangle \approx D_s t$, with s being a distance in phase space and D_s the diffusion constant. Performing time evolution up to a time t^* requires t^* quantum operations multiplied by logarithmic factors. At this stage, a fixed number of coarse-grained measurements is enough to give an approximation of D_s. On a classical computer, one can truncate the Hilbert space up to the maximal dimension effectively used in the calculation, which is of the order $\sqrt{t^*}$. Propagating the wave packet will cost $t^*\sqrt{t^*}$ classical operations, after which D_s can be obtained. Therefore the quantum computation is polynomially faster than the classical one. Methods which use an ancilla qubit to measure the value of phase-space distributions at a given point such

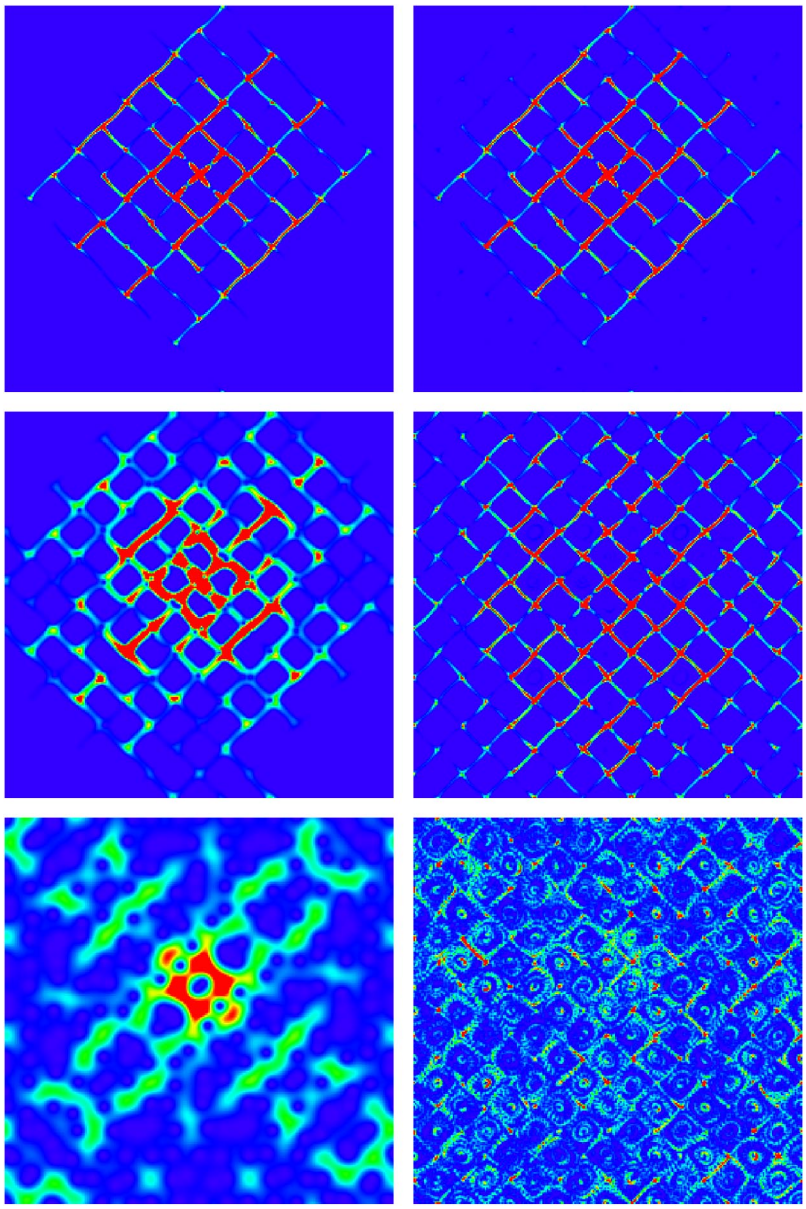


FIG. 10. (Color online) Example of Husimi distribution of a wave packet spreading on the stochastic web; here $K=L=0.5$, $\hbar=2\pi\times 64/2^{n_r}$ (8×8 cells), initial state is a Gaussian wave packet of area $\hbar$ started half a cell above the center of the figure, after 100 iterations using 2×40 slices per iteration. Left: $\varepsilon=0$ and from top to bottom $n_r=14$, $n_r=11$, $n_r=8$ ($n_q=n_r+1$). Right: $n_r=14$ and from top to bottom $\varepsilon=10^{-6}$, $\varepsilon=10^{-5}$, $\varepsilon=10^{-4}$. Color/grayness is related to amplitude of the Husimi function, from zero (blue/black) to maximal value (red/white). Compare with the classical diffusion in Fig. 2.

as the ones in [32,40] will necessitate extra measurements since they cannot be used to perform coarse-grained measurements efficiently. Still, by reducing K,L as n_r is increased, one can keep the number of large components of the Husimi function of the wave packet of order N_H (instead of N_H^2). In this case, the Husimi function measured on the ancilla qubit of [32] is efficiently measurable. This is formally an exponential gain over direct classical simulation since measuring one component of the Husimi distribution at a fixed time t will be logarithmic in N_H. The same happens for coarse-grained measurements at fixed t. Still, as $\hbar$ goes to exponentially small values the dynamics for fixed t will become very close to the classical one, so it is unclear which new information can be gained this way.

To clarify the stability of these algorithms with respect to errors, in Fig. 11 we show quantitatively the effects of imperfections on the Husimi distributions for a wave packet spreading on the stochastic web for various numbers of qubits and imperfection strengths. We computed the time scale t_h for various parameter values, t_h being the time (number of iterations) for which the error on the Husimi functions is half the mean value of that function on the stochastic web.

The numerical data suggest the law

$$t_h \approx C_h/(\varepsilon^{\alpha} n_q^{\beta}), \tag{8}$$

with $\alpha=1.02\pm 0.02$ (compatible with $\alpha=1$) and $\beta=1.23\pm 0.09$ with $C_h\approx 0.007$. This law is polynomial in both ε and n_q, which indicates that even though individual values of the Husimi function can be exponentially small, the effect of imperfections remains small compared to these individual values for a polynomial time. This means that such quantities can be reliably obtained in presence of moderate levels of imperfections. More work is needed to understand the precise origin of the law (8). We note that in [11] where random noise in the quantum gates were used as main source of errors a similar polynomial (but different) law was found for the relative error on the Husimi function.

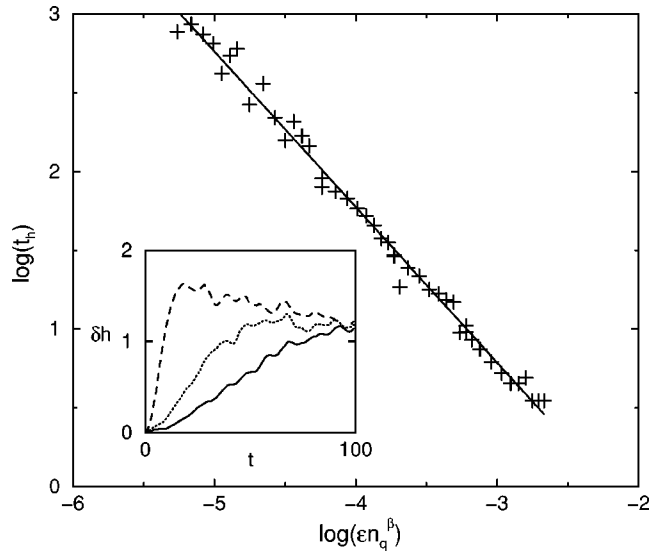


FIG. 11. Effects of imperfections on the Husimi distribution of a wave packet spreading on the stochastic web; here $K=L=0.5$, $\hbar=2\pi\times 64/2^{n_r}$ (8×8 cells), initial state is a Gaussian wave packet of area $\hbar$ started half a cell above the center of the Fig. 2, and iterations are made by the slice method using 2×40 slices per iteration. Straight line is the law (8) with $\alpha=1$ and $\beta=1.23$. Crosses corresponds to various values of ε ($10^{-6}\leqslant\varepsilon\leqslant 10^{-4}$) and n_r ($5\leqslant n_r\leqslant 14$, with $n_q=n_r+1$); averages were made over all Husimi components inside the stochastic web and up to 100 realizations of disorder for each ε value. Inset: average relative error of the Husimi function $\delta h=\langle|h_\varepsilon-h_0|\rangle/\langle h_0\rangle$ on the stochastic web for $\varepsilon=10^{-4}$ (dashed line), $\varepsilon=10^{-4.5}$ (dotted line), $\varepsilon=10^{-5}$ (solid line), and $n_r=10$ ($n_q=n_r+1$). Average is taken over all Husimi components inside the stochastic web and 10 realizations of disorder. Logarithms are decimal.

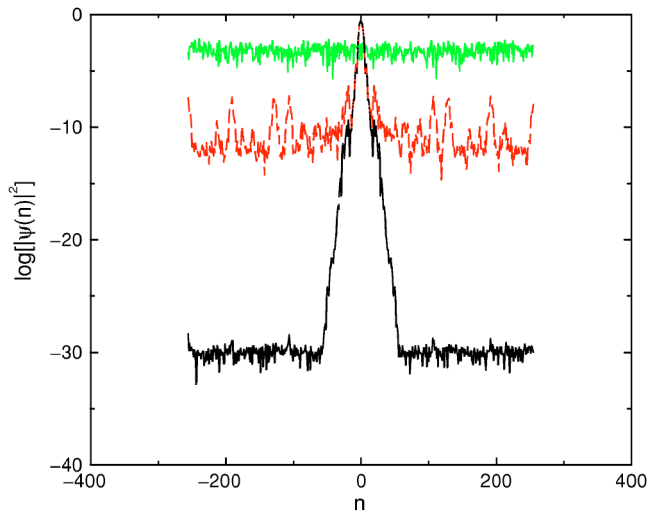


FIG. 12. (Color online) Example of wave function in the localized regime. Here $K=1$, $L=5$, $\hbar/(2\pi)=(13-\sqrt{5})/82$ (actual value is the nearest fraction with denominator 2^{n_r}), initial state is $|\psi_0\rangle=|0\rangle$, after 1000 iterations using 2×40 slices per iteration, $n_r=8$ ($n_q=n_r+1$), from bottom to top $\varepsilon=0$ (black, solid line), $\varepsilon=10^{-7}$ (red, dashed line), and $\varepsilon=10^{-3}$ (green, solid line). In the center, the first two curves are superposed and indistinguishable. Logarithm is decimal.

B. Localized regime

When K is large enough for the chaotic zone to take most of the classical phase space, a classical particle will propagate diffusely in phase space. In contrast, for moderate values of the parameter K, all the eigenstates of the evolution operator $\hat{U}$ of (4) are localized (see Fig. 3). This localization is a purely quantum phenomenon due to interference effects and similar to the Anderson localization of electrons in solids. In this parameter regime, an initial wave packet will have projections on only a small number of exponentially localized eigenstates. Thus after a few iterations of the map, the wave packet will stop spreading and stay in a region of momentum space of size given by the localization length. An example of such a wave function is shown in Fig. 12.

In this regime, it is possible to measure the localization length l efficiently. Indeed, most of the probability is concentrated in a domain of size l. If one performs a coarse grained measurement of the wave function—i.e., only the most significant qubits are measured—the number of measurements will set the precision in units of l. Thus once the desired relative precision is fixed, the number of measurements is independent of l or n_q. Nevertheless, if one starts from an easily prepared initial wave packet—for example, on a single momentum state—one has to evolve it long enough to reach a saturation regime where the wave function is spread on a domain of size $\approx l$. Classically, in the parameter regime where the system is chaotic, the dynamics is diffusive $\langle n(t)^2\rangle\approx Dt$ with a diffusion constant D which depends on parameters. One can expect the wave packet to follow for short time this diffusive behavior which will stop when a spreading comparable to the localization length is reached. In this case, the wave packet needs to be evolved until a time $t^*\approx l^2/D$. Classically, one needs to evolve a vector of dimension $\sim l$ until the time t^*; this needs $\sim l^3$ classical operations. On a quantum computer, once the precision is set, the three algorithms above need only a logarithmic number of gates to perform one iteration, so the total number of gates is $\sim l^2$. This gives a polynomial improvement for the quantum algorithm. It is known that in the delocalized phase, the wave packet can spread ballistically for some regimes of parameter. If this extends to short times and to the localized regime, then the gain becomes quadratic.

In Fig. 12, an example of a localized wave function is shown for different imperfection strengths. At $\varepsilon=0$, the exponential localization is clearly visible, the exponential decay being leveled off at very small values ($\approx 10^{-30}$) only by numerical roundoff. For larger values of ε, the localized peak is still visible with the correct amplitude, but a larger and larger background is visible, until the peak disappears.

To analyze in a more precise way the effects of imperfections, we have to specify the observable that is used to get the localization length. On a classical computer, different data analyses can be used to calculate the localization length from knowledge of the wave function. A first way consists in extracting the second moment of the wave function $\langle(\Delta n)^2\rangle$, which gives an estimate of l once the saturation regime is reached. One can also compute the inverse participation ratio

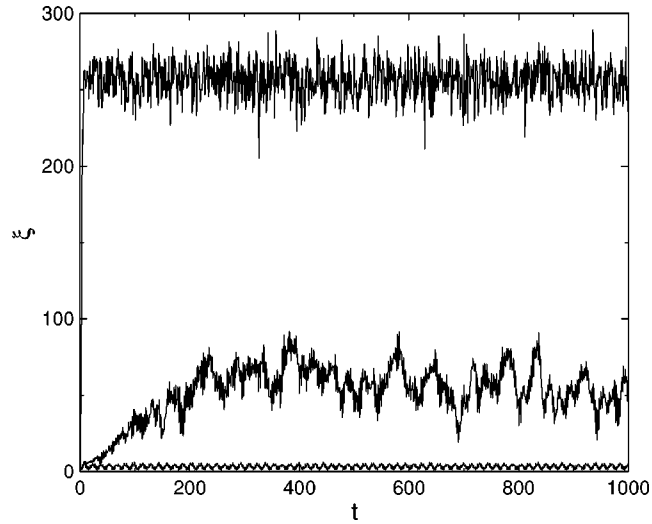


FIG. 13. Example of IPR with imperfections as a function of time, in the localized regime. Parameters values are the same as in Fig. 12, $n_r=8$ ($n_q=n_r+1$), from bottom to top $\varepsilon=0$, $\varepsilon=10^{-7}$, $\varepsilon=10^{-4}$, and $\varepsilon=10^{-3}$. Data from $\varepsilon=0$ and $\varepsilon=10^{-7}$ are indistinguishable.

(IPR) $\xi=1/\Sigma_n|\psi(n)|^4$. For a wave function uniformly spread over M states this quantity is equal to M, and therefore it also gives an estimate of the localization length. At last, l can be measured directly by fitting an exponential function around maximal values of ψ.

For an exact wave function, all three quantities give similar results. On a quantum computer, they may have very different behavior with respect to imperfection strength. Indeed, it was shown in general [11,41] that the second moment is exponentially sensitive to the number of qubits in presence of imperfections, making it a poor way to get information about transport properties. The IPR was shown [41] to be polynomially sensitive to both number of qubits and imperfection strength. Still, the IPR may be difficult to measure directly on a quantum computer. On the other hand, the direct measurement of l by fitting an exponential curve on a coarse-grained measure of the wave function was shown in [41] to be an effective way to extract l from a quantum computation of the wave function. It is therefore interesting to study the behavior of both latter quantities with respect to imperfections.

In Fig. 13, the time evolution of the IPR is shown for different values of the imperfection strength. For $\varepsilon=0$, the wave packet first spreads for $t<t^*$, and then the IPR becomes approximately constant and close to the localization length. For larger values of ε, the wave packet spreads to much larger parts of phase space, but the IPR still saturates after some time to a value which depends on ε and n_q.

The average value of this saturation value is shown in Fig. 14 as a function of ε for different values of n_q. Figure 15 shows the localization length obtained from curve fitting for the same wave functions. For large enough values of ε, the IPR grows very quickly, in a manner which seems exponentially dependent on n_q. The result of the curve-fitting strategy is roughly similar, but shows an intermediate regime ($\varepsilon\approx10^{-4}$ for our data) where it is still reasonably close to the exact value while the IPR is already quite far off. This can be understood qualitatively from the data shown in Fig. 12. Indeed, the effect of moderate static imperfections is to create a larger and larger background over which the localization peak is superimposed. The IPR is sensitive to the presence of this background, while by its very definition the curve-fitting strategy isolates the localization peak from the background and is therefore more robust. The data presented in Fig. 15 show that this peak keeps its shape with relatively good accuracy until its final disappearance, even though a large

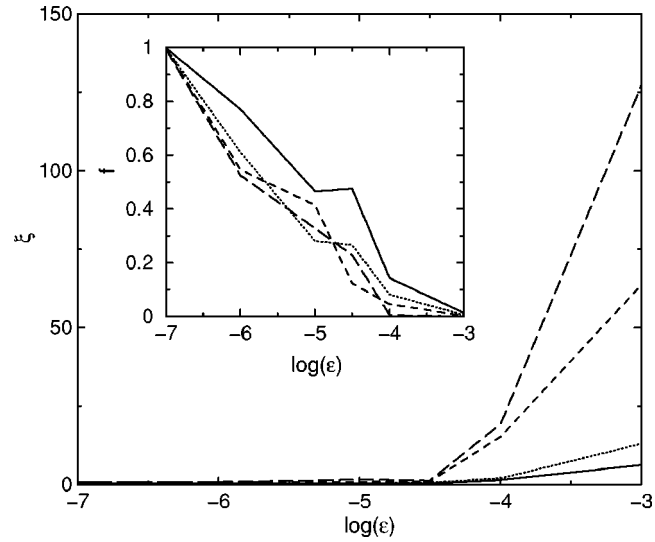


FIG. 14. IPR as a function of imperfection strength in the localized regime. Parameters values are the same as in Fig. 12, with $n_r=7$ (solid line), $n_r=8$ (dotted line), $n_r=9$ (dashed line), and $n_r=10$ (long-dashed line) ($n_q=n_r+1$). Averages were made over up to 10 realizations of disorder. Inset: fidelity as a function of imperfection strength in the localized regime, with same parameter values and line codes as in the main figure. Logarithms are decimal.

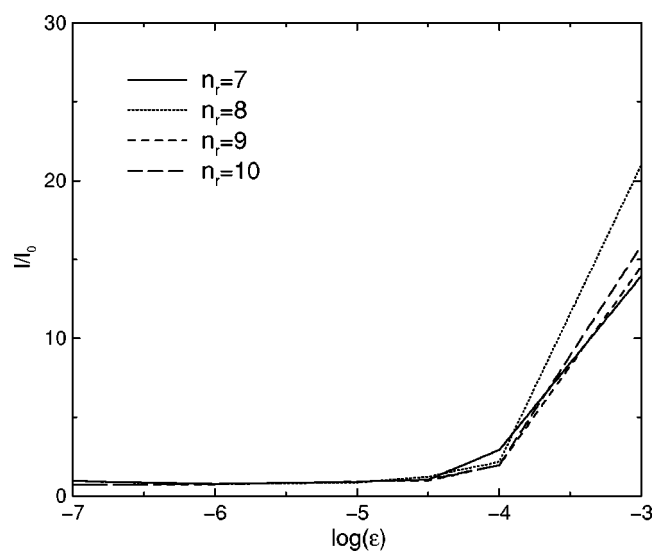


FIG. 15. Localization length as a function of imperfection strength in the localized regime. Parameters values are the same as in Fig. 12, with averages made over up to 10 realizations of disorder. Logarithm is decimal.

chunk of its amplitude has been transfered elsewhere by imperfections. The inset of Fig. 14 shows the fidelity of the same wave functions $[f(t)=|\langle\psi(t)|\psi_\varepsilon(t)\rangle|^2$ where $|\psi(t)\rangle$ is the exact wave function and $|\psi_\varepsilon(t)\rangle$ the one in presence of imperfections]. It is interesting to note that the localization length and IPR can be quite well reproduced even for values of ε where the fidelity is already quite low.

A more precise analysis can be developed from the effect of imperfections on the eigenstates of the unperturbed evolution operator $\hat{U}$ in Eq. (4). These eigenstates $|\psi_a\rangle$ can be written as a sum over momentum states $|m\rangle$, which coincide with quantum register states of the quantum computer when the system is in momentum representation:

$$|\psi_a\rangle = \sum_{m=1}^{N_H} c_a^m |m\rangle. \tag{9}$$

In the localized regime, the eigenstates $|\psi_a\rangle$ are localized with localization length l; therefore, the c_a^m are significant only for $\sim l$ values of m, with an average value of $1/\sqrt{l}$. Using perturbation theory, one can estimate the typical matrix element of the imperfection Hamiltonian (6) between eigenstates. For the first term of Eq. (6), this gives

$$V_{typ} \sim \left| \langle\psi_b| \sum_{i=1}^{n_q} \delta_i \widehat{\sigma_i^z} \tau_g n_g |\psi_a\rangle \right| \sim \tau_g n_g \left| \sum_{m,n=1}^{N_H} c_a^m c_b^{n*} \langle n| \sum_{i=1}^{n_q} \delta_i \widehat{\sigma_i^z} |m\rangle \right|, \tag{10}$$

where $N_H=2^{n_r}$ is the dimension of Hilbert space on which $\hat{U}$ acts, τ_g is the time for one gate, and the term due to Δ_0 in Eq. (6) is not taken into account since it can be eliminated easily. This estimate (10) is an approximation, since the action of Eq. (6) is separated from the action of $\hat{U}$ and in reality they are intertwined and do not commute. In Eq. (10), only $\sim l$ neighboring quantum register states are coupled through n_q terms of different detuning δ_i (with random sign). This term therefore gives on average $\varepsilon n_g \sqrt{n_q}/\sqrt{l}$. The second term of Eq. (6) in the same approximation will be the sum of n_q terms, each coupling one state $|m\rangle$ with another state differing by two neighboring qubits $|n\rangle=|m+r\rangle$. So a state $|\psi_a\rangle$ is coupled significantly only to states $|\psi_b\rangle$ localized at a distance r in momentum from $|\psi_a\rangle$. Therefore the same estimate applies, and overall one can estimate $V_{typ}\sim \varepsilon n_g \sqrt{n_q}/\sqrt{l}$.

One can suppose that the IPR will become large when perturbation theory breaks down. This happens when V_{typ} is comparable to the distance between directly coupled states Δ_c. From the arguments above, one expects that one state is coupled to $\sim l$ states so that this distance is $\Delta_c \sim 1/l$. The threshold when IPR or localization length become large is therefore $V_{typ}\sim\Delta_c$ which corresponds to

$$\varepsilon_c \approx C_1/(n_g\sqrt{n_q}\sqrt{l}), \tag{11}$$

where C_1 is a numerical constant and n_g is number of gates per iteration, n_q number of qubits, and l the localization length. Figure 16 is compatible with this scaling, with $C_1/\sqrt{l}\approx 0.3$. We note that this threshold is similar to the threshold for the transition to quantum chaos presented for a quantum computer not running an algorithm in [35].

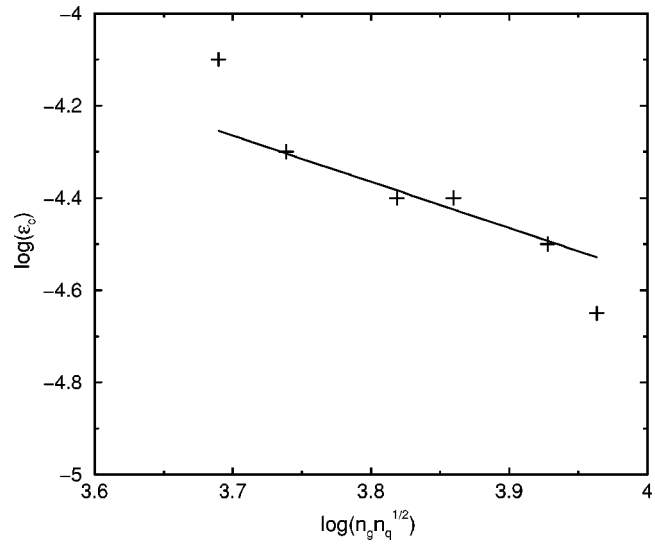


FIG. 16. Critical value of ε (error strength) as a function of parameters for $K=2$, $L=27$, with other parameter values the same as in Fig. 12. ε_c is defined by a saturation value of IPR twice the unperturbed value. Averages were made with up to 10 realizations of disorder. Solid line is the formula (11). Logarithms are decimal.

When perturbation theory breaks down, it is usually expected from earlier works on quantum many-body physics [35,42] that the system enters a Breit-Wigner regime where the local density of states is a Lorentzian of half-width $\Gamma \approx 2\pi|V_{typ}|^2/\Delta_c$ according to the Fermi golden rule. This implies that the IPR grows like $\Gamma/\Delta_n \sim \varepsilon^2 n_g^2 n_q N$, where $\Delta_n \sim 1/N_H \sim 1/N$ is the mean level spacing ($N=2N_H$ since there is an ancilla qubit). This is not confirmed by the data shown on Fig. 17, which suggest that the IPR scales like ε. This indicates that in our system we are in a regime different from the golden rule (Breit-Wigner) regime.

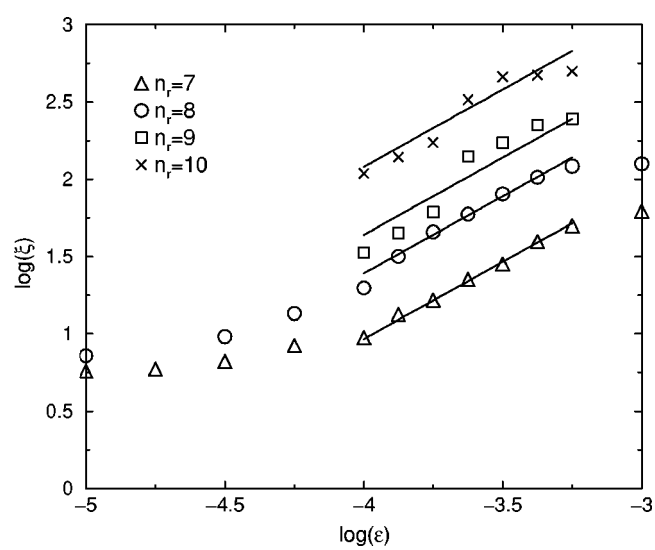


FIG. 17. IPR as a function of ε. Parameters values are the same as in Fig. 16. Solid lines correspond to the dependence $\xi \propto \varepsilon$. Logarithms are decimal.

Such a regime is present for large perturbation strength in many-body systems. It is indeed known that for large enough values of the couplings, the system leaves the golden rule regime and enters a new regime where the local density of states is a Gaussian of width given by the variance σ. The variance can be approximated by $\sigma^2 \sim \Sigma_{b\neq a} V_{typ}^2 \sim \varepsilon^2 n_g^2 n_q$. In this regime the IPR is given by $\sigma/\Delta_n \sim \varepsilon n_g \sqrt{n_q} N$, which is consistent with data from Figs. 14 and 17. This regime is known to supersede the golden rule regime for $\Gamma > \sigma$, which should therefore be the case for our system. This implies that the relevant time scale for the system to remain close to the exact one is $1/\sigma$. For the largest values of n_q, the data in Fig. 17 show some departure from this law, which may be due simply to statistical fluctuations (the averaging is made over more instances for smaller n_q) or a shift toward the golden rule regime for large n_q.

The scaling laws obtained in this regime show that for $\varepsilon < \varepsilon_c$, with ε_c given by Eq. (11), the system is still localized in presence of imperfections, and the localization length is close to the exact one. In this case, the localization length is correct for very long times, much longer than for example the fidelity decay time. For larger ε, the system with imperfections is delocalized. We still expect it to be close to the exact one up to a time $\sim 1/\sigma \sim 1/(\varepsilon n_g \sqrt{n_q})$.

C. Partially delocalized regime

For larger values of K at L fixed, the system enters a partially delocalized region. In this regime, there is a coexistence of localized and delocalized eigenstates. An initial wave packet will have significant projections on all delocalized eigenstates but only on neighboring localized eigenstates. After a certain number of time steps (kicks) the part corresponding to delocalized states will spread in all the system, while the localized part will remain close to the initial position. Figure 18 shows an example of a wave packet initially at $n=0$ after 100 iterations in this regime, displaying an exponential peak corresponding to localization superimposed on a plateau which spreads with time to larger and larger momentum. It is known that the spreading of the wave packet in this regime (for large enough time) is ballistic away from the line $K=L$ and diffusive on this line.

In this regime, as above a coarse-grained measurement can give the localized part with moderate accuracy, thus enabling one to compute the localization length. As in the preceding part, the gain over classical computation will be polynomial. As concerns the delocalized part of the wave function, it seems at first sight that getting information on it is difficult, since it takes very long time to reach its saturation distribution (it has to spread diffusively or ballistically through the whole system), and this distribution itself is spread over the exponentially large system. Still, after a time large enough for the wave packet to spread beyond the localization length, the structure of the wave function can be seen very clearly from coarse-grained measurements whose number is on the order of the localization length. Once such a coarse-grained measurement has been performed and the localization length found by fitting an exponential function around the maximum, the relative importance of the plateau

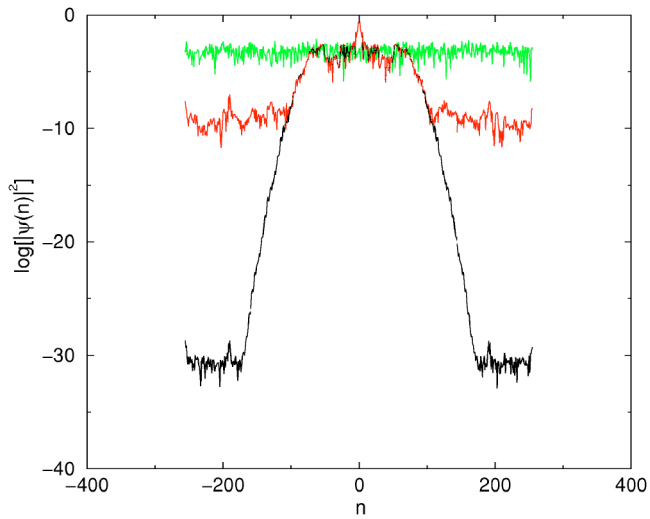


FIG. 18. (Color online) Example of wave function in the partially delocalized regime. Here $K=2$, $L=5$, $\hbar/(2\pi)=(13-\sqrt{5})/82$ (actual value is the nearest fraction with denominator 2^{n_r}), initial state is $|\psi_0\rangle=|0\rangle$, after 100 iterations using 2×40 slices per iteration, $n_r=8$ ($n_q=n_r+1$), from bottom to top $\varepsilon=0$ (black, solid line), $\varepsilon=10^{-7}$ (red, dashed line), and $\varepsilon=10^{-3}$ (green, solid line). In the center, the first two curves are superposed and indistinguishable. Logarithm is decimal.

can be found by subtracting the localized part. Even though the plateau has not yet reached its final distribution, its integrated probability is related to the number of eigenstates which are delocalized at these parameter values. This information enables us to monitor the transition precisely for different values of K and L, nontrivial information as seen from Fig. 3. The number of operations for classical and quantum algorithms are the same as for the localization length, and therefore the same polynomial gain can be expected. Another quantity which can be readily obtained is the quantum diffusion constant. Indeed, away from the line $K=L$, it is known that a quantum wave packet initially localized in momentum will spread anomalously (ballistically) with the law $\langle n^2(t)\rangle \approx D_a t^2$. Classically, estimating the diffusion constant requires one to simulate the system until some time t^*. This requires one to evolve $\sim t^*$ quantum states until the time t^*, making the total number of operation $\sim (t^*)^2$. On a quantum computer, one time step requires a logarithmic number of operations, so the total number of operations is $\sim t^*$ (t^* iterations followed by a constant number of coarse-grained measurements), a quadratic gain compared to the classical algorithm. Close to the line $K=L$, the quantum diffusion becomes normal with the law $\langle n^2(t)\rangle \approx D_n t$. In this regime, the same computation gives a number of operation $\sim (t^*)^{3/2}$ classically compared to $\sim t^*$ for the quantum algorithm, with still a polynomial gain. Such computations can give quite interesting results, in particular to specify precisely which kind of diffusion is present in the vicinity of the line $K=L$, a question which is not definitively settled.

Effects of different strengths of imperfections can be seen in Fig. 18. For moderate values of ε, a flat background of larger and larger amplitude is created by the imperfections. When this background reaches the values of the plateau due

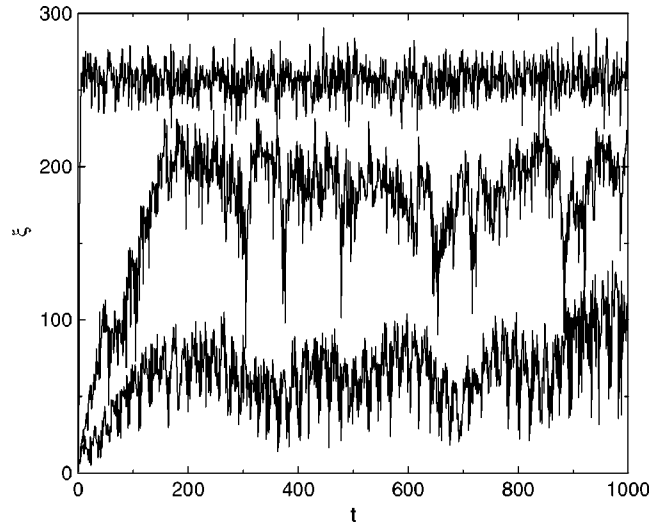


FIG. 19. Example of IPR in presence of imperfections as a function of time in the transition regime. Here $K=4$, $L=5$, $\hbar/(2\pi)=(13-\sqrt{5})/82$ (actual value is the nearest fraction with denominator 2^{n_r}), initial state is $|\psi_0\rangle=|0\rangle$ with 2×40 slices per iteration, $n_r=8$ ($n_q=n_r+1$), from bottom to top $\varepsilon=0$, $\varepsilon=10^{-7}$, $\varepsilon=10^{-4}$, and $\varepsilon=10^{-3}$. Data from $\varepsilon=0$ and $\varepsilon=10^{-7}$ are indistinguishable.

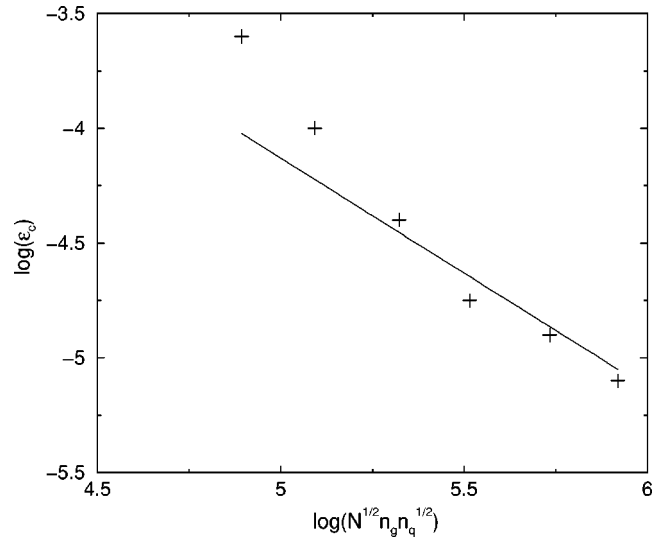


FIG. 20. Critical value of ε (error strength) as a function of parameters for $K=10$, $L=27$ with other parameter values the same as in Fig. 18. ε_c is defined by a saturation value of IPR twice the unperturbed value. Averages were made with up to 10 realizations of disorder. Solid line is the formula (12). Logarithms are decimal.

to delocalized states, information on these delocalized states is lost, but the localized peak remains until ε is large enough to destroy it. This is visible also in Fig. 19 which displays the time evolution of a wave function in this transition region. The data for $\varepsilon=0$ show the spreading of the wave packet due to delocalized eigenstates; the IPR does not reach the dimension of Hilbert space since part of the amplitude does not spread due to localized states. For intermediate values of ε, the spreading concerns more and more of the total amplitude, increasing the IPR, until a large enough value of ε is reached and the wave function is completely delocalized.

In this regime, the analysis of the preceding section should be modified. Indeed, a certain fraction β of the Floquet eigenstates $|\psi_a\rangle$ of $\hat{U}$ (unperturbed) in Eq. (4) are not localized. For these delocalized states, the c_a^m of Eq. (9) have small nonzero values $\sim 1/\sqrt{N_H}$ for all m. The estimation $V_{typ}\sim \varepsilon n_g\sqrt{n_q}/\sqrt{l}$ for the typical matrix element of the imperfection Hamiltonian (6) between eigenstates $|\psi_a\rangle$ and $|\psi_b\rangle$ remains correct only if $|\psi_a\rangle$ and $|\psi_b\rangle$ are both localized.

If $|\psi_a\rangle$ and $|\psi_b\rangle$ are both delocalized, one has $c_a^m\sim c_b^n \sim 1/\sqrt{N_H}$ in Eq. (10) for most m,n. This implies that the quantities $\Sigma_{m=1}^{N_H} c_a^m c_b^m$, previously of order $1/\sqrt{l}$, becomes $\sim 1/\sqrt{N_H}$ (sum of N_H terms of order $\sim 1/N_H$ with random signs). This modifies the estimate for V_{typ}: with the same reasoning as in the localized case, one has $V_{typ} \sim \varepsilon n_g\sqrt{n_q}/\sqrt{N_H}$.

If one of the states $|\psi_a\rangle$ and $|\psi_b\rangle$ is localized and the other one delocalized, then $\Sigma_{m=1}^{N_H} c_a^m c_b^m$ is the sum of l terms of order $\sim 1/(\sqrt{l}\sqrt{N_H})$ with random signs, which is of order $\sim 1/\sqrt{N_H}$. This gives the same estimate $V_{typ}\sim \varepsilon n_g\sqrt{n_q}/\sqrt{N_H}$ for the matrix element as if both states were delocalized.

Therefore, if a proportion β of the unperturbed Floquet eigenstates are delocalized, both localized and delocalized eigenstates will have matrix elements of order $V_{typ} \sim \varepsilon n_g\sqrt{n_q}/\sqrt{N_H}$ with βN_H other eigenstates. This will be the dominant effect, since these couplings lead perturbation theory to break down much earlier than for the purely localized system. Indeed, V_{typ} is comparable to the distance between directly coupled states $\Delta_c\sim 1/N_H\sim 1/N$ (since $N=2N_H$) for $\varepsilon n_g\sqrt{n_q}/\sqrt{N}\sim 1/N$, which corresponds to

$$\varepsilon_c \approx C_2/(n_g\sqrt{n_q}\sqrt{N}), \tag{12}$$

where C_2 is a numerical constant, n_g the number of gates per iteration, n_q the number of qubits, and $N=2^{n_q}$ the dimension of the Hilbert space of the quantum computer. Figure 20 is compatible with this scaling, with $C_2\approx 7.4$.

In this regime, the critical interaction strength drops therefore *exponentially* with the number of qubits, in sharp contrast with the localized regime. This effect has been noted for a different system in [43] and is similar to the enhancement of weak interaction in heavy nuclei [44]. The physical mechanism is that the much smaller coupling term between states is compensated by the even smaller distance in energy between coupled states. This result implies that even for moderate number of qubits, a small interaction strength is enough to modify enormously the long-time behavior of the system: saturation values of the IPR are very much affected by the perturbation, much more so than in the localized regime. However, for short time the behavior of the system should be close to the unperturbed one, implying that the measures suggested to get interesting information, such as relative size of the plateau and diffusion constants can still be accessible.

Figure 21 shows examples of the growth of the IPR as a function of K and imperfection strength. In the partially delocalized zone, the figure shows a growth of the IPR with K, which is strongly affected by imperfections. An interesting quantity is the value of the transition point between localized

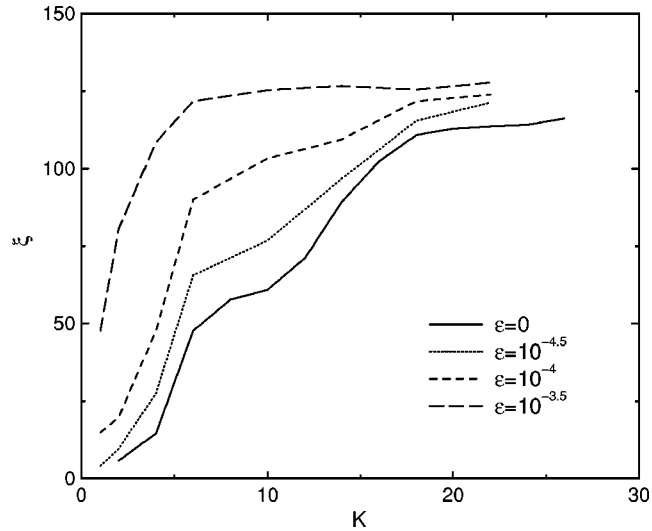


FIG. 21. IPR in presence of imperfections as a function of K in the transition regime. Here $L=27$, $\hbar/(2\pi)=(13-\sqrt{5})/82$ (actual value is the nearest fraction with denominator 2^{n_r}), initial state is $|\psi_0\rangle=|0\rangle$, IPR is shown after 100 iterations using 2×40 slices per iteration, and $n_r=8$ ($n_q=n_r+1$), with averages made over 10 realizations of disorder.

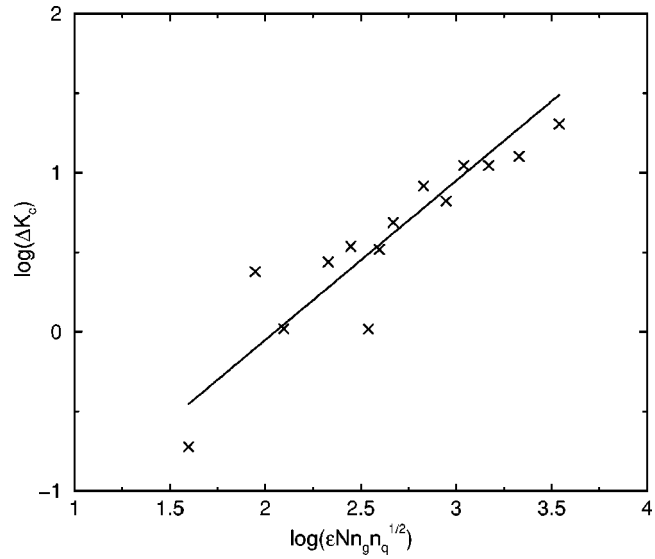


FIG. 22. Shift of the transition point due to imperfections as a function of imperfection strength and n_q. Parameters values are the same as in Fig. 21, with averages made over up to 10 realizations of disorder. Solid line corresponds to the dependence $\Delta K_c \propto \varepsilon n_g \sqrt{n_q} N$. Logarithms are decimal.

and delocalized states. In systems such as the Anderson model investigated in [30], the transition point is well defined, since all states are localized or delocalized on one side of the transition. In the case of the kicked Harper model there is some arbitrariness in the definition. We chose as transition point the value K_c (at L fixed) for which the IPR is $N_H/4 = N/8$ (even for a totally delocalized state, the IPR is actually often $N_H/2=N/4$ instead of N_H due to fluctuations). In the partially delocalized regime, the IPR at fixed K should grow with ε. If the system is in the Breit-Wigner (golden rule) regime, the IPR should grow as Γ/Δ_n where $\Delta_n \sim 1/N$ is the mean level spacing and $\Gamma \approx 2\pi|V_{typ}|^2/\Delta_c \sim \varepsilon^2 n_g^2 n_q$. We therefore expect the transition point to move with imperfections as $\Gamma/\Delta_n \sim \varepsilon^2 n_g^2 n_q N$. On the contrary, in the Gaussian regime, the IPR grows like σ/Δ_n, where $\sigma \sim \varepsilon n_g \sqrt{n_q}$. In this case the transition point should move as $\varepsilon n_g \sqrt{n_q} N$.

Figure 22 shows the data numerically obtained for the shift of the transition point due to imperfections. It indicates that $\Delta K_c \sim \varepsilon n_g \sqrt{n_q} N$ agrees with the data, whereas $\varepsilon^2 n_g^2 n_q N$ is a much less reasonable scaling variable (data not shown). The data therefore seem to indicate that in the partially delocalized regime as in the localized regime, the IPR grows as $\varepsilon n_g \sqrt{n_q} N$, as does the shift of the transition point. This result is in sharp contrast with the findings of [30] for the Anderson transition, which was shown to scale polynomially with the number of qubits. In our case, the presence of delocalized state coexisting with localized states makes the delocalization much easier in presence of imperfections.

Figure 23 shows the scaling of the IPR as a function of ε. For small values of n_q, the IPR without imperfections is already a large fraction of Hilbert space dimension, so data are meaningful only for $n_r \geqslant 9$. Still, data shown in Fig. 23 seem to indicate that the regime where $\xi \propto \varepsilon$ is present, confirming that the system is in a Gaussian regime rather than in the golden rule regime.

The scaling laws obtained in this regime show that there is an exponentially small value ε_c given by Eq. (12) above which imperfections destroy the localization properties of the system. In particular, the transition point is exponentially sensitive to the number of qubits. This sharp difference between localized and delocalized regime can be easily seen on experiments: the long-time behavior of the system will be very different in both cases. Still, the algorithms presented can be useful in delocalized regime in presence of imperfections, even for $\varepsilon > \varepsilon_c$. Indeed, the system should remain close to the exact one up to a time $\sim 1/\sigma \sim 1/(\varepsilon n_g \sqrt{n_q})$ as in the localized regime, so measurability of physical quantities

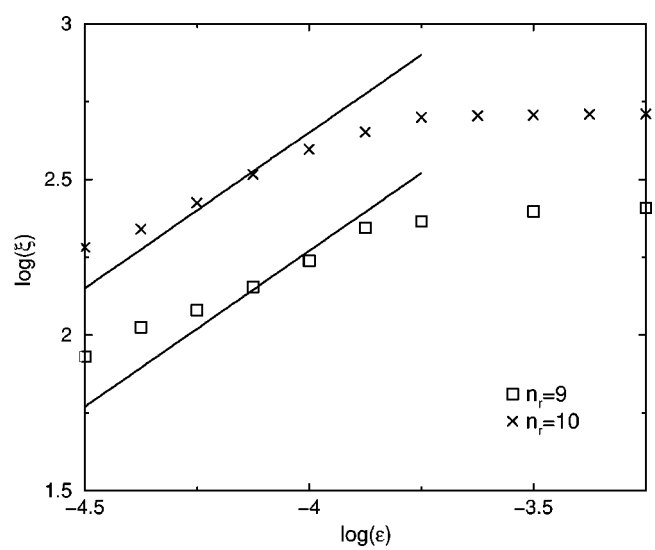


FIG. 23. IPR as a function of ε for $K=10$, $L=27$ with other parameter values the same as in Fig. 18. Solid lines correspond to the dependence $\xi \propto \varepsilon$. Logarithms are decimal.

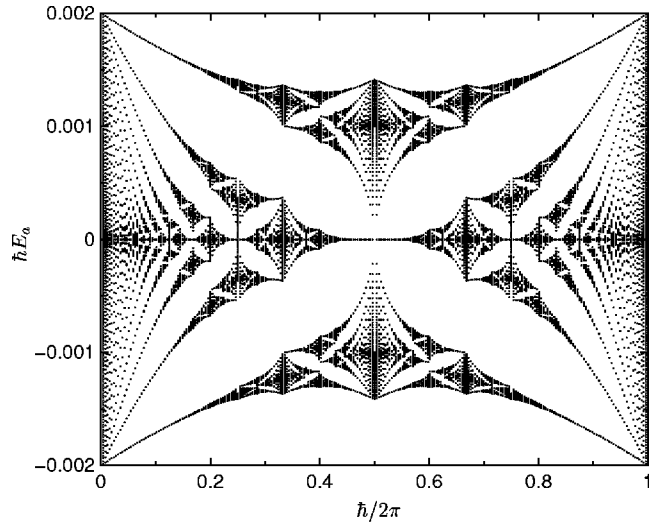


FIG. 24. Eigenphases of the Harper operator (4) as a function of $\hbar$ for $K=L=10^{-3}$; $n_r=8$.

will eventually rest on the comparison of this time scale with the time for the system to show the delocalization plateau. On the contrary, in the localized regime for moderate levels of imperfections the localization length can be measured for very long times.

V. SPECTRUM: MEASUREMENT AND IMPERFECTION EFFECTS

Another type of physical properties which can be obtained through quantum simulation of the kicked Harper model concerns the spectrum of the evolution operator $\hat{U}$. This spectrum has been the focus of many studies (see, e.g., [23]): it shows multifractal properties, and transport properties (localized or delocalized states) are reflected in the eigenvalues, as well as dynamical properties (chaotic or integrable states). Additionally, for small $K=L$, this spectrum will be close to the famous spectrum of the Harper model ("Hofstadter butterfly"), which shows fractal properties [15], as can be seen in Fig. 24.

To get information about eigenvalues, we can use the phase estimation algorithm. This algorithm, at the heart of the Shor algorithm, proceeds by transforming the state $\Sigma_t|t\rangle|\psi_0\rangle$ into $\Sigma_t|t\rangle|U^t\psi_0\rangle$. Then a QFT of the first register will give peaks at the values of the eigenphases of U. To be efficient, this process should be applied to operators U for which exponentially large iterates can be obtained in polynomial number of operations. In [45] it was suggested that even if this condition is not fulfilled one can obtain approximate eigenvalues exponentially fast provided one starts from an initial state $|\psi_0\rangle$ already close to an eigenvector. In the case at hand, we do not know how to get exponentially large iterates in polynomial time or how to build a good approximation of the eigenvectors without knowing them. We therefore suggest a third strategy, which is more generally applicable than the ones above, but does not yield an exponential gain.

We first build the state $\Sigma_{t=0}^{N_H-1}|t\rangle|\psi_0\rangle$, where $|\psi_0\rangle$ is an arbitrary quantum state on a Hilbert space of dimension $N_H=2^{n_r}$ which can be efficiently built; for example, it can be the state $2^{-n_r/2}\Sigma_n|n\rangle$, which can be obtained from $|0\rangle$ with n_r Hadamard gates. Once the state $|0\rangle|\psi_0\rangle$ is realized, it can be transformed with n_r Hadamard gates on the first register into $2^{-n_r/2}\Sigma_{t=0}^{N_H-1}|t\rangle|\psi_0\rangle$. We have seen that the evolution operator U can be implemented in poly $(\log N_H)$ operations by the three strategies exposed in Sec. III. Therefore we can apply powers of U on the second register controlled by the value of the first register. This yields $2^{-n_r/2}\Sigma_t|t\rangle|U^t\psi_0\rangle$ in $O(N_H)$ operations, up to logarithmic factors. A QFT of the first register will yield peaks centered at eigenvalues of the operator U. Thus measurement of the first register will give an eigenvalue of U with good probability in $O(N_H)$ operations including measurement. A drawback of this approach is that peaks have additional probabilities on nearby locations, and since the number of eigenvalues is N_H, measuring the precise shape of all peaks will be inefficient [$O(N_H^2)$ operations]. A more precise, although slower, method is to use amplitude amplification [46] (a method derived from the Grover algorithm [3]) to zoom on a small part of the spectrum. This enables to get the precise values of all eigenvalues in a given interval. The total cost will be $O(N_H\sqrt{N_H})$ operations. This methods which uses Grover's search on phase estimation can be seen as a process reverse to quantum counting [47] (where phase estimation is used on the Grover operator).

Calculating the spectrum by direct diagonalization of a $N_H\times N_H$ matrix such as the one of the operator $\hat{U}$ of Eq. (4) requires in general of the order of N_H^3 classical operations. However, in the case of the operator $\hat{U}$ of Eq. (4) there is a faster classical method similar to the quantum phase estimation algorithm: one iteration of $\hat{U}$ can be computed classically in $O(N_H)$ operations (up to logarithmic factors) by using the classical FFT algorithm to shift between n and θ representations and multiplying by the relevant phase in each representation. Iterating this process N_H times and keeping each intermediate wave function costs $O(N_H^2)$ operations. Then a FFT enables to get the spectrum of U with $O(N_H \log N_H)$ operations. This method was advocated in [48] for getting the spectrum of the kicked Harper model. Therefore it is possible to get the spectrum classically in $O(N_H^2)$ operations up to logarithmic factors. Thus the quantum algorithms explained above [$O(N_H)$ operations for one eigenvalue with unknown precision, $O(N_H\sqrt{N_H})$ for all eigenvalues in a given small interval] realize a polynomial gain compared to the classical ones. It is important to note that although the number of operations needed is only polynomially better in the quantum case, the spatial resources are exponentially smaller (logarithmic number of qubits compared to the number of classical bits).

The Figs. 25–27 show the spectrum of the kicked Harper model in presence of errors for both slice and Chebyshev methods. The error model chosen is the static imperfection Hamiltonian (6) as in the preceding section. The evolution operator was computed by evolving basis states in presence of errors and then diagonalizing the resulting operator. The spectrum shown corresponds to small $K=L$, where the spectrum is close to the "Hofstadter butterfly," as can be seen in Fig. 24. Only 16 eigenvalues are shown. Overall phase shifts

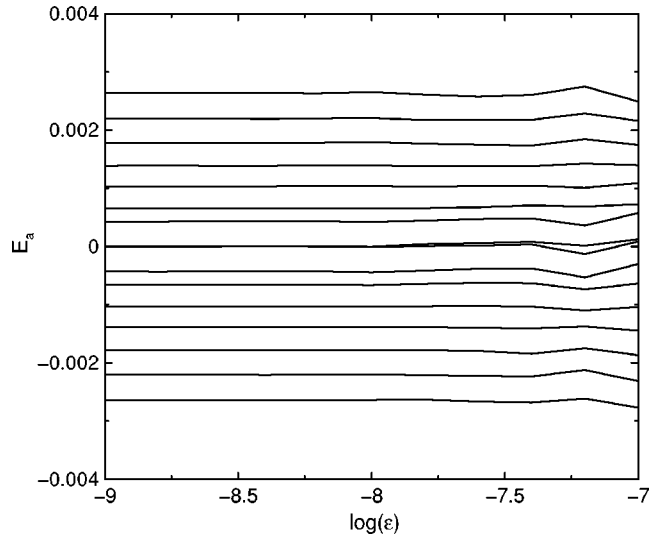


FIG. 25. Eigenphases of the evolution operator $\hat{U}$ of Eq. (4) as a function of imperfection strength. The slice method is used with 2×100 slices to compute the operator. The 16 eigenphases closest to 0 are shown. Here $n_r=6$ ($n_q=n_r+1$), $\hbar=2\pi/2^6$ (actual value is the nearest fraction with denominator 2^6), and $K=L=10^{-3}$. An overall phase factor (global motion of eigenvalues) has been eliminated. Logarithm is decimal.

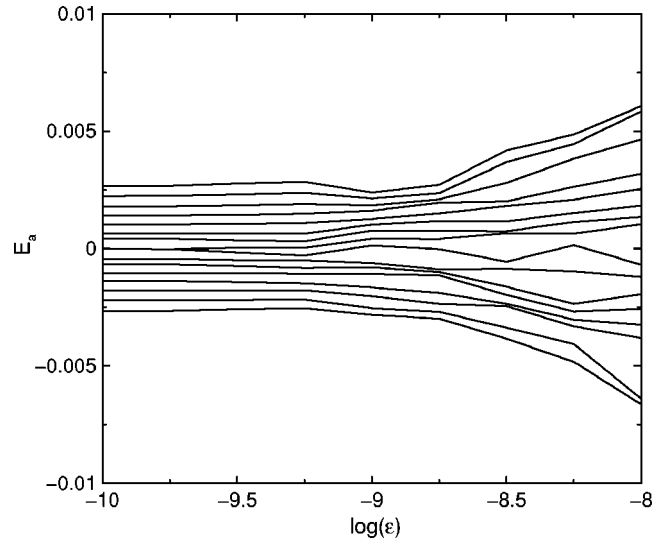


FIG. 27. Eigenphases of the evolution operator $\hat{U}$ of Eq. (4) as a function of imperfection strength. The Chebyshev method is used; a Chebyshev polynomial of degree 6 is taken, keeping all gates. The 16 eigenphases closest to 0 are shown. Here $n_r=6$ ($n_q=n_r$), $\hbar=2\pi/2^6$ (actual value is the nearest fraction with denominator 2^6), and $K=L=10^{-3}$. An overall phase factor (global motion of eigenvalues) has been eliminated. Logarithm is decimal.

due to errors were eliminated since it seems reasonable they can be estimated and compensated. It is clear from the data presented that eigenvalues are much more sensitive to strength of errors than transport properties. Numerical limitations prevented us to find the scaling in n_q of error effects, but Figs. 26–28 show the scaling with respect to ε at constant n_q.

In the case of the slice method, the average error on the eigenvalue is clearly linear in ε. We think this corresponds probably to a perturbative regime, since small values of ε are involved. For the Chebyshev method, our data indicate that a lower level of errors is needed than in the slice method to get good accuracy. This could have been expected, since we established in Sec. III that this method necessitates more gates for a similar accuracy, and each gate introduces errors. The scaling of errors with respect to ε indicates the law $\Delta E \sim \varepsilon^{\alpha}$ with $\alpha\approx 1.3$.

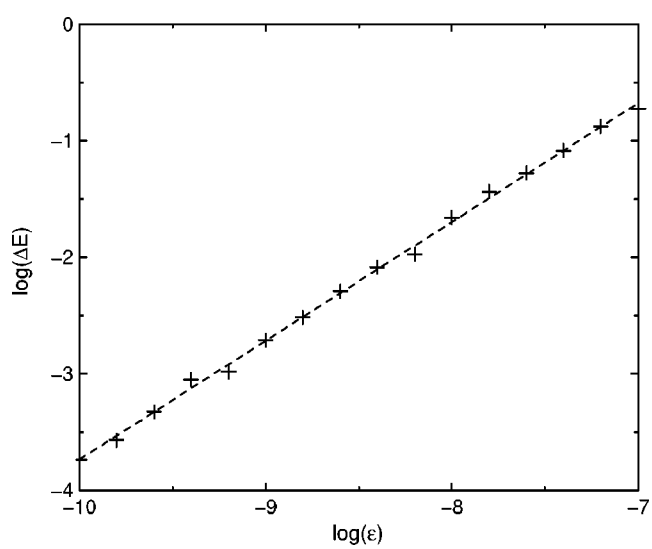


FIG. 26. Average error (in units of mean level spacing) of computed eigenphases through the slice method as a function of imperfection strength; parameters are the same as in Fig. 25, and averages were made over all eigenvalues and over 10 realizations of disorder. Dashed line corresponds to $\Delta E\propto\varepsilon$. Logarithms are decimal.

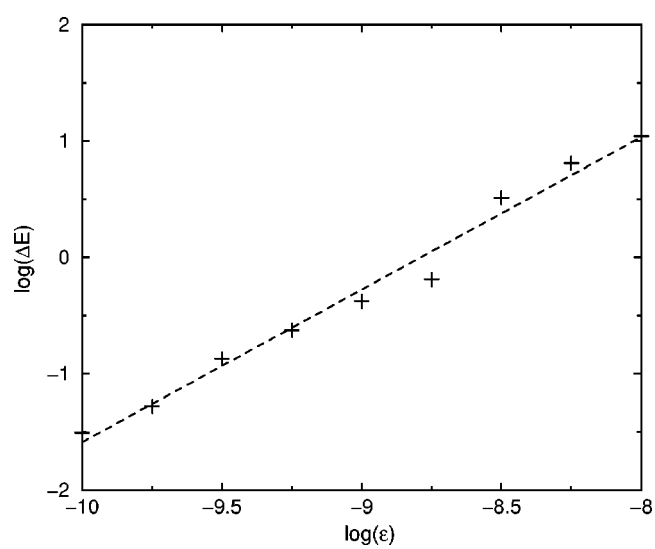


FIG. 28. Average error (in units of mean level spacing) of computed eigenphases through the Chebyshev method as a function of imperfection strength; parameters are the same as in Fig. 27, and averages were made over all eigenvalues. Dashed line corresponds to $\Delta E\propto\varepsilon^{1.3}$. Logarithms are decimal.

VI. CONCLUSION

In this paper, several quantum algorithms were presented which enable to simulate the quantum kicked Harper model, a complex system with relevance to certain physical problems. The comparison showed that while the slice method and the Chebyshev method are approximate, they are much more economical in resources than the exact simulation. It was also shown that different transport and spectral properties can be obtained more efficiently on a quantum computer than classically, although the gain is only polynomial. Numerical simulations enabled us to precise the effect of numerical errors on these algorithms and also to evaluate the effects of imperfections. The results show that depending on the regime of parameters, the same quantity can be stable or exponentially sensitive to imperfections. In general, in presence of moderate amount of errors the results of the algorithm can be meaningful, but a careful choice of the measured quantities should be done. For the different quantities computed, the slice method was shown to be more efficient and resilient to errors than the Chebyshev method, although the latter is similar to the method used in classical computers to evaluate functions.

Our results show that interesting quantum effects such as fractal-like spectrum, localization properties, and anomalous diffusion are already visible with 7–8 qubits. We therefore believe that such algorithms could be used in experimental implementations in the near future.

ACKNOWLEDGMENTS

We warmly thank Dima Shepelyansky for many helpful suggestions in the course of this work and also Andrei Pomeransky and Klaus Frahm for several discussions. We thank the IDRIS in Orsay and CalMiP in Toulouse for access to their supercomputers. This work was supported in part by the NSA and ARDA under ARO Contract No. DAAD19-01-1-0553, by EC RTN Contract No. HPRN-CT-2000-0156, and by project EDIQIP of the IST-FET program of the EC.

[1] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2000).
[2] P. W. Shor, in *Proceedings of the 35th Annual Symposium on the Foundations of Computer Science*, edited by S. Goldwasser (IEEE Computer Society, Los Alamitos, CA, 1994), p. 124.
[3] L. K. Grover, Phys. Rev. Lett. **79**, 325 (1997).
[4] S. Lloyd, Science **273**, 1073 (1996); D. S. Abrams and S. Lloyd, Phys. Rev. Lett. **79**, 2586 (1997).
[5] D. A. Lidar and O. Biham, Phys. Rev. E **56**, 3661 (1997); A. Sørensen and K. Mølmer, Phys. Rev. Lett. **83**, 2274 (1999).
[6] B. Georgeot and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **86**, 5393 (2001).
[7] B. Georgeot, Phys. Rev. A **69**, 032301 (2004).
[8] R. Schack, Phys. Rev. A **57**, 1634 (1998).
[9] Y. S. Weinstein, S. Lloyd, J. Emerson, and D. G. Cory, Phys. Rev. Lett. **89**, 157902 (2002).
[10] B. Georgeot and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **86**, 2890 (2001).
[11] B. Lévi, B. Georgeot, and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. E **67**, 046220 (2003).
[12] G. Benenti, G. Casati, S. Montangero, and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **87**, 227901 (2001).
[13] K. M. Frahm, R. Fleckinger, and D. L. Shepelyansky, Eur. Phys. J. D **29**, 139 (2004).
[14] P. G. Harper, Proc. Phys. Soc., London, Sect. A **68**, 874 (1955).
[15] D. R. Hofstadter Phys. Rev. B **14**, 2239 (1976).
[16] A. Barelli, J. Bellissard, and R. Rammal, J. Phys. (Paris) **51**, 2167 (1990); A. Barelli and C. Kreft, J. Phys. I **1**, 1229 (1991).
[17] T. Geisel, R. Ketzmerick, and G. Petschel, Phys. Rev. Lett. **66**, 1651 (1991).
[18] M. Wilkinson and R. J. Kay Phys. Rev. Lett. **76**, 1896 (1996).
[19] S. N. Evangelou and J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. **84**, 1643 (2000).
[20] P. Leboeuf, J. Kurchan, M. Feingold, and D. P. Arovas, Phys. Rev. Lett. **65**, 3076 (1990).
[21] R. Lima and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **67**, 1377 (1991).
[22] R. Artuso, G. Casati, and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **68**, 3826 (1992).
[23] R. Artuso, F. Borgonovi, I. Guarneri, L. Rebuzzini, and G. Casati, Phys. Rev. Lett. **69**, 3302 (1992); R. Artuso, G. Casati, F. Borgonovi, L. Rebuzzini, and I. Guarneri, Int. J. Mod. Phys. B **8**, 207 (1994).
[24] I. Dana, Phys. Rev. Lett. **73**, 1609 (1994).
[25] F. Borgonovi, and D. L. Shepelyansky, Europhys. Lett. **29** (2), 117 (1995).
[26] R. Ketzmerick, K. Kruse, and T. Geisel, Phys. Rev. Lett. **80**, 137 (1998).
[27] T. Prosen, I. I. Satija, and N. Shah, Phys. Rev. Lett. **87**, 066601 (2001).
[28] P. Leboeuf and A. Mouchet, Phys. Rev. Lett. **73**, 1360 (1994).
[29] O. Brodier, P. Schlagheck, and D. Ullmo, Phys. Rev. Lett. **87**, 064101 (2001).
[30] A. A. Pomeransky and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. A **69**, 014302 (2004).
[31] V. V. Dobrovitski, H. A. De Raedt, M. I. Katsnelson, and B. N. Harmon, Phys. Rev. Lett. **90**, 210401 (2003).
[32] J. P. Paz, A. J. Roncaglia, and M. Saraceno, Phys. Rev. A **69**, 032312 (2004).
[33] D. Jaksch and P. Zoller, New J. Phys. **5**, 56 (2003).
[34] J. Stoer and R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis* (Springer-Verlag, New York, 1993).
[35] B. Georgeot and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. E **62**, 3504 (2000); **62**, 6366 (2000).
[36] M. Terraneo and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **90**, 257902 (2003).
[37] E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932); M. V. Berry, Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A **287**, 237 (1977).
[38] C. Miquel, J. P. Paz, and M. Saraceno Phys. Rev. A **65**,

062309 (2002).
[39] S.-J. Chang and K.-J. Shi, Phys. Rev. A **34**, 7 (1986).
[40] C. Miquel, J. P. Paz, M. Saraceno, E. Knill, R. Laflamme, and C. Negrevergne, Nature (London) **418**, 59 (2002).
[41] G. Benenti, G. Casati, S. Montangero, and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. A **67**, 052312 (2003); G. Benenti, G. Casati, and S. Montangero, Quantum Inf. Process. **3**, 53 (2004).
[42] B. Georgeot and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **79**, 4365 (1997); V. V. Flambaum and F. M. Izrailev, Phys. Rev. E **56**, 5144 (1997).
[43] G. Benenti, G. Casati, S. Montangero, and D. L. Shepelyansky, Eur. Phys. J. D **20**, 293 (2002).
[44] O. P. Sushkov and V. V. Flambaum, Sov. Phys. Usp. **25**, 1 (1982).
[45] D. S. Abrams and S. Lloyd Phys. Rev. Lett. **83**, 5162 (1999).
[46] G. Brassard and P. Høyer, in *Proceedings of Fifth Israeli Symposium on Theory of Computing and Systems* (IEEE Computer Society, Los Alamitos, CA, 1997), pp. 12–23; G. Brassard, P. Høyer, M. Mosca, and A. Tapp, in *Quantum Computation and Quantum Information: A Millennium Volume*, edited by S. J. Lomonaco, Jr. and H. E. Brandt (AMS, Contemporary Mathematics Series Vol. 305, 2002).
[47] M. Boyer, G. Brassard, P. Høyer, and A. Tapp, Fortschr. Phys. **46**, 493 (1998).
[48] R. Ketzmerick, K. Kruse, and T. Geisel, Physica D **131**, 247 (1999).

Chapitre 5

Conclusion

Cette étude montre qu'une dynamique complexe peut être simulée de manière fiable et efficace sur un ordinateur quantique réaliste. Des algorithmes quantiques ont été présentés pour simuler des modèles importants du chaos quantique, ayant des applications en physique atomique et physique du solide, le rotateur pulsé quantique et le modèle de Harper pulsé. Les méthodes employées se généralisent à toute une classe de modèles, les applications pulsées. Les effets de petites erreurs unitaires ou d'imperfections statiques sur ces modèles ont été caractérisés. Il a été ainsi mis en évidence que certaines quantités physiques sont robustes face à des imperfections modérées, alors que d'autres y sont très sensibles. Le comportement de ces quantités en présence d'erreur dépend également du jeu de paramètres considéré. De même, selon le régime des quantités physiques peuvent être extraites efficacement, avec un gain au moins polynomial par rapport à une simulation sur un ordinateur classique.

La plupart des algorithmes présentés ici sont très économes, applicables avec un petit nombre de qubits, et demandant un nombre de portes qui varie polynomialement avec la taille du registre. Ils sont donc bien adaptés pour une implémentation expérimentale dans les prochaines années. La résonance magnétique nucléaire permet déjà de manipuler quelques qubits, ce qui a permis de réaliser par exemple l'application du boulanger quantique [94]. Un sujet non abordé dans cette thèse est d'augmenter la protection de la fonction d'onde par des codes correcteurs d'erreur [71, 84, 88]. Cependant, même s'ils sont asymptotiquement assez efficaces les codes correcteurs quantiques usuels sont très gourmands en nombre de qubits. On peut toutefois minimiser les effets cohérents des erreurs statiques en utilisant la méthode Pauli-Random-Error-Correction, récemment introduite dans [55]. L'avantage de cette procédure est qu'elle ne demande pas de qubit supplémentaire pour fonctionner. Enfin, un travail a été commencé pour établir les expressions analytiques des lois de variation de quelques quantités dans le régime chao-

tique. En effet, dans ce régime l'ergodicité permet d'appliquer la théorie des matrices aléatoires et d'obtenir ces quantités comme des moyennes sur des ensembles particuliers de matrices [38].

Le calcul quantique est un domaine récent en plein développement, et d'autres études seront nécessaires pour connaître précisément son champ d'application et son efficacité.

Annexe A

Fonctions de Wigner et Husimi

Pour une particule quantique, le principe d'incertitude d'Heisenberg interdit l'existence d'une véritable distribution de probabilité dans l'espace des phases. On ne peut en effet pas définir la probabilité qu'une particule ait une position q et une quantité de mouvement p puisque ces deux quantités ne peuvent pas avoir simultanément des valeurs bien définies. Néanmoins, il est possible de concevoir différentes distributions de pseudo-probabilité qui possèdent des propriétés proches de celles d'une distribution de probabilité classique [51, 62, 91, 96]. Bien entendu, aucune de ces distributions ne les possède toutes, mais le physicien avisé pourra toujours choisir à son gré celle qui lui semble la plus appropriée selon ses contraintes. Ces distributions se montrent particulièrement utiles lorsqu'il s'agit de mener à bien des calculs semi-classique, par exemple lorsqu'un système quantique interagit avec un autre système décrit classiquement. Ceci leur ouvre des champs d'application assez divers, tels que la mécanique statistique des systèmes quantiques hors d'équilibre, ou l'optique quantique. Elles peuvent être également plus facilement comparées qu'une fonction d'onde à la distribution de probabilité classique dans l'espace des phases.

A.1 Fonction de distribution générale

Considérons une particule quantique décrite par une matrice densité $\hat{\rho}$, et l'on s'intéresse à la valeur moyenne d'une observable représentée par un opérateur fonction de la position et de la quantité de mouvement $\hat{O}(\hat{q}, \hat{p})$

$$\left\langle \hat{O} \right\rangle = \mathrm{Tr}\left\{ \hat{\rho}\, \hat{O} \right\}$$

Par analogie avec la mécanique classique, on cherche à exprimer cette valeur moyenne comme une moyenne sur tout l'espace des phases d'une certaine

forme scalaire $O(q,p)$ de l'opérateur $\hat{O}$ multipliée par une pseudo-probabilité de présence $P(q,p)$ de la particule en ce point

$$\left\langle \hat{O}(\hat{q},\hat{p}) \right\rangle = \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}p\, O(q,p)P(q,p) \tag{A.1}$$

Pour donner un sens à cette expression, il faut bien sûr préciser comment obtenir O et P en fonction de $\hat{O}$ et $\hat{\rho}$ respectivement. L'approche naïve qui consiste à remplacer directement $\hat{q}$ et $\hat{p}$ par q et p dans l'expression de $\hat{O}(\hat{q},\hat{p})$ conduit malheureusement à une impasse. Prenons par exemple deux fonctions f_1 et f_2

$$\begin{aligned} f_1(\hat{q},\hat{p}) &= \hat{p}\hat{q}^2\hat{p} \\ f_2(\hat{q},\hat{p}) &= \frac{1}{2}\left(\hat{p}^2\hat{q}^2 + \hat{q}^2\hat{p}^2\right) + \hbar^2 \end{aligned}$$

On a bien $f_1(\hat{q},\hat{p}) = f_2(\hat{q},\hat{p})$, mais $f_1(q,p) \neq f_2(q,p)$. Deux opérateurs identiques peuvent donc conduire par ce procédé à des fonctions scalaires différentes, et réciproquement, deux opérateurs différents peuvent correspondre à la même fonction scalaire.

Il faut donc définir une règle de correspondance qui associe de manière univoque une fonction $A(q,p)$ et un opérateur $\hat{O}(\hat{q},\hat{p})$. Pour ce faire, on commence par développer $O(q,p)$ en une intégrale de Fourier

$$O(q,p) = \iint \mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta\,\omega(\xi,\eta)e^{i(\xi q+\eta p)} \tag{A.2}$$

Le problème se réduit alors à choisir l'opérateur qui correspond à la fonction particulière $e^{i(\xi q+\eta p)}$. Cela revient a choisir la façon dont on doit ordonner q et p dans le développement de Taylor de $e^{i(\xi q+\eta p)}$ avant de les remplacer par $\hat{q}$ et $\hat{p}$. Par exemple, un premier choix peut être de placer tous les q à gauche et les p à droite

$$e^{i(\xi q+\eta p)} \longleftrightarrow e^{i\xi\hat{q}}e^{i\eta\hat{p}}$$

C'est l'ordre standard. L'ordre anti-standard (qui conduit à la distribution de Kirkwood) consiste à faire exactement l'inverse, c'est-à-dire placer tous les p avant les q

$$e^{i(\xi q+\eta p)} \longleftrightarrow e^{i\eta\hat{p}}e^{i\xi\hat{q}}$$

Un cas particulièrement important est l'ordre de Weyl, qui sera développé plus loin

$$e^{i(\xi q+\eta p)} \longleftrightarrow e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}$$

Dans la suite, on se restreindra à une relation de correspondance de la forme

$$e^{i(\xi q+\eta p)} \longleftrightarrow e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}f(\xi,\eta)$$

Cette forme simple englobe des cas assez variés : l'ordre de Weyl bien sûr, mais également les ordres standards et anti-standard, ainsi que les ordres normal et anti-normal qui seront définis plus tard. Avec cette relation de correspondance, l'opérateur $\hat{O}$ s'exprime comme

$$\hat{O}(\hat{q},\hat{p}) = \iint \mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta\,\omega(\xi,\eta)e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}f(\xi,\eta) \tag{A.3}$$

On est alors en mesure de définir la fonction de distribution $P_f(q,p)$ par

$$\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}(\hat{q},\hat{p})e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}f(\xi,\eta)\right\} = \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}p\,e^{i(\xi q+\eta p)}P_f(q,p) \tag{A.4}$$

ou

$$P_f(q,p) = \frac{1}{4\pi^2}\iint \mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta\,\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}(\hat{q},\hat{p})e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}f(\xi,\eta)\right\}e^{-i(\xi q+\eta p)} \tag{A.5}$$

Comme f ne dépend pas de $\hat{\rho}$, cette fonction de distribution a l'avantage d'être bilinéaire en la fonction d'onde. On peut en effet concevoir d'autres définitions qui ne possèdent pas cette propriété, comme par exemple $|\psi(q)|^2\,|\psi(p)|^2$. En appliquant (A.2) et (A.3) sur les membres de droite et de gauche de (A.4), on obtient ainsi une expression analogue à celle souhaitée pour calculer la valeur moyenne (A.1)

$$\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}\,\hat{O}\right\} = \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}p\,O(q,p)P_f(q,p)$$

avec $\hat{O}$ et O liés par la relation de correspondance énoncée plus haut.

Enfin, il est souvent pratique d'écrire la distribution P_f comme la valeur moyenne d'un opérateur $\hat{A}_f(q,p)$, connu sous le nom d'opérateur point de l'espace des phases (phase space point operator), ou opérateur de Fano.

$$P_f(q,p) = \mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}\,\hat{A}_f(q,p)\right\} \tag{A.6}$$

D'après (A.5), $\hat{A}_f$ est donné par la formule générale

$$\hat{A}_f(q,p) = \frac{1}{4\pi^2}\iint \mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta\,e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}f(\xi,\eta)e^{-i(\xi q+\eta p)} \tag{A.7}$$

A.2 Distribution de Wigner

Dans le cas de la distribution de Wigner, on choisit l'ordre de Weyl

$$e^{i(\xi q+\eta p)} \longleftrightarrow e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}$$

ou, de manière équivalente, on choisit la fonction f particulière $f_W(\xi,\eta)=1$. D'après le théorème de Baker-Hausdorff, si deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ commutent avec leur commutateur $[\hat{A},\hat{B}]$, alors

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$$

Comme $[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar$, on peut réécrire $\exp(i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p}))$ sous la forme

$$e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})} = e^{i\frac{\eta}{2}\hat{p}}e^{i\xi\hat{q}}e^{i\frac{\eta}{2}\hat{p}} \tag{A.8}$$

De plus, on a

$$e^{i\eta\hat{p}}\left|q\right\rangle = \left|q-\eta\hbar\right\rangle \tag{A.9}$$

Grâce à ces deux identités, on a

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}\right\} &= \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'\left\langle q\left|\hat{\rho}\right|q'\right\rangle\left\langle q'\left|e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}\right|q\right\rangle \\
&= \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'\left\langle q\left|\hat{\rho}\right|q'\right\rangle\left\langle q'+\frac{\eta}{2}\hbar\left|q-\frac{\eta}{2}\hbar\right.\right\rangle e^{i\xi(q-\frac{\eta}{2}\hbar)} \\
&= \int \mathrm{d}q'\left\langle q'+\frac{\eta}{2}\hbar\left|\hat{\rho}\right|q'-\frac{\eta}{2}\hbar\right\rangle e^{i\xi q'}
\end{aligned}$$

D'après (A.5), la distribution de Wigner a donc pour expression

$$\begin{aligned}
P_W(q,p) &= \frac{1}{4\pi^2}\iint \mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta\,\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}\right\}e^{-i(\xi q+\eta p)} \\
&= \frac{1}{4\pi^2}\iiint \mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta\,\mathrm{d}q'\left\langle q'+\frac{\eta}{2}\hbar\left|\hat{\rho}\right|q'-\frac{\eta}{2}\hbar\right\rangle e^{i\xi(q'-q)}e^{-i\eta p}
\end{aligned}$$

Soit

$$P_W(q,p) = \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}\eta\left\langle q+\frac{\eta}{2}\hbar\left|\hat{\rho}\right|q-\frac{\eta}{2}\hbar\right\rangle e^{-i\eta p} \tag{A.10}$$

On peut remarquer que $P_W^*(q,p)=P_W(q,p)$, donc la distribution de Wigner est réelle. Par contre, elle peut prendre des valeurs négatives, comme on le verra plus tard. Dans le cas d'un état pur, c'est-à-dire lorsque $\hat{\rho}=\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|$, on a

$$P_W(q,p) = \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}\eta\, e^{-i\eta p}\,\psi^*\!\left(q-\frac{\eta}{2}\hbar\right)\psi\!\left(q+\frac{\eta}{2}\hbar\right)$$

En utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on voit que

$$\begin{aligned}
\left|P_W(q,p)\right| &= \frac{1}{\pi\hbar}\left|\int \mathrm{d}x\, e^{-2i\frac{px}{\hbar}}\,\psi^*(q-x)\,\psi(q+x)\right| \\
&\leq \frac{1}{\pi\hbar}\left\|e^{-2i\frac{px}{\hbar}}\,\psi^*(q-x)\right\|\left\|\psi(q+x)\right\|
\end{aligned}$$

Soit, pour un état pur

$$\left|P_W(q,p)\right| \leq \frac{1}{\pi\hbar}$$

Cette inégalité est aussi valable dans le cas d'un état mixte, puisqu'il suffit d'appliquer le même raisonnement à

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right| \text{ avec } 0 \leq p_i \leq 1 \text{ et } \sum_i p_i = 1$$

On va maintenant établir certaines propriétés particulièrement utiles de l'opérateur point de l'espace des phases correspondant à la distribution de Wigner. D'après (A.7)

$$\hat{A}_W(q,p) = \frac{1}{4\pi^2} \iint \mathrm{d}\xi\, \mathrm{d}\eta\, e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})} e^{-i(\xi q+\eta p)}$$

En utilisant (A.8) et (A.9), on montre que

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}\left\{\hat{A}_W(q,p)\hat{A}_W(q',p')\right\} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^4} \iiiint\!\!\int \mathrm{d}\xi\, \mathrm{d}\xi'\, \mathrm{d}\eta\, \mathrm{d}\eta'\, \mathrm{d}q''\, e^{-i(\xi q+\eta p)} e^{-i(\xi' q'+\eta' p')} \\
&\qquad\qquad \times \left\langle q'' \middle| e^{i\frac{\xi}{2}\hat{q}}\, e^{i\eta\hat{p}}\, e^{i\frac{\xi}{2}\hat{q}}\, e^{i\frac{\xi'}{2}\hat{q}}\, e^{i\eta'\hat{p}}\, e^{i\frac{\xi'}{2}\hat{q}} \middle| q'' \right\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^4} \iiiint\!\!\int \mathrm{d}\xi\, \mathrm{d}\xi'\, \mathrm{d}\eta\, \mathrm{d}\eta'\, \mathrm{d}q''\, e^{-i(\xi q+\eta p)} e^{-i(\xi' q'+\eta' p')} \\
&\qquad\qquad \times e^{i\frac{\xi}{2}q''} e^{i\frac{\xi+\xi'}{2}(q''-\eta'\hbar)} e^{i\frac{\xi'}{2}q''} \delta\big[(\eta+\eta')\hbar\big] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^4\hbar} \iiiint \mathrm{d}\xi\, \mathrm{d}\xi'\, \mathrm{d}\eta\, \mathrm{d}q''\, e^{-i(\xi q+\eta p)} e^{-i(\xi' q'-\eta p')} e^{i(\xi+\xi')q''} e^{i\frac{\xi+\xi'}{2}\eta\hbar} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar(2\pi)^2} \iiint \mathrm{d}\xi\, \mathrm{d}\xi'\, \mathrm{d}\eta\, e^{-i(\xi q+\eta p)} e^{-i(\xi' q'-\eta p')} e^{i\frac{\xi+\xi'}{2}\eta\hbar} \delta(\xi+\xi') \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar(2\pi)^2} \iint \mathrm{d}\xi\, \mathrm{d}\eta\, e^{-i\xi(q-q')} e^{-i\eta(p-p')}
\end{aligned}$$

D'où la relation

$$\mathrm{Tr}\left\{\hat{A}_W(q,p)\hat{A}_W(q',p')\right\} = \frac{1}{2\pi\hbar}\, \delta(q-q')\, \delta(p-p') \tag{A.11}$$

Les $\hat{A}_W(q,p)$ sont donc un ensemble d'opérateurs orthogonaux. D'autre part, on peut montrer qu'ils forment également une base complète, c'est-à-dire que tout opérateur hermitien peut s'écrire comme une combinaison linéaire des A_W.

$$\hat{O} = 2\pi\hbar \int \mathrm{d}q\, \mathrm{d}p\, \mathrm{Tr}\left\{\hat{O}\hat{A}_W(q,p)\right\} \hat{A}_W(q,p)$$

Dans le cas particulier de l'opérateur densité, les coefficients sont tout simplement les valeurs de la fonction de Wigner en chaque point

$$\hat{\rho} = 2\pi\hbar \int \mathrm{d}q\, \mathrm{d}p\, P_W(q,p)\hat{A}_W(q,p)$$

Dans la base des positions, les A_W ont pour expression

$$\begin{aligned}
\left\langle q' \left| \hat{A}_W(q,p) \right| q'' \right\rangle &= \frac{1}{4\pi^2} \iint \mathrm{d}\xi \, \mathrm{d}\eta \, \left\langle q' \left| e^{i\frac{\eta}{2}\hat{p}} \, e^{i\xi\hat{q}} \, e^{i\frac{\eta}{2}\hat{p}} \right| q'' \right\rangle e^{-i(\xi q + \eta p)} \\
&= \frac{1}{4\pi^2} \iint \mathrm{d}\xi \, \mathrm{d}\eta \, \delta(q' - q'' + \eta\hbar) \, e^{i\xi\left(q'' - \frac{\eta}{2}\hbar\right)} e^{-i(\xi q + \eta p)} \\
&= \frac{1}{4\pi^2\hbar} \int \mathrm{d}\xi \, e^{i\xi\left(\frac{q'+q''}{2} - q\right)} e^{i\frac{p}{\hbar}(q'-q'')} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \, \delta\left(q - \frac{q'+q''}{2}\right) e^{i\frac{p}{\hbar}(q'-q'')} \qquad \text{(A.12)}
\end{aligned}$$

De même, dans la base des impulsions

$$\left\langle p' \left| \hat{A}_W(q,p) \right| p'' \right\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \, \delta\left(p - \frac{p'+p''}{2}\right) e^{-i\frac{q}{\hbar}(p'-p'')}$$

On peut exprimer $A_W(q,p)$ d'une autre manière assez élégante en introduisant l'opérateur de translation continue

$$\hat{D}(q,p) = e^{-\frac{i}{\hbar}(q\hat{p} - p\hat{q})} \qquad \text{(A.13)}$$

et l'opérateur de réflexion dans l'espace des $|q\rangle$

$$\hat{R} \, |q\rangle = |-q\rangle$$

On a

$$\begin{aligned}
\left\langle q' \left| \hat{D}(q,p)\hat{R}\hat{D}^\dagger(q,p) \right| q'' \right\rangle &= \left\langle q' \left| e^{\frac{i}{\hbar}p\hat{q}} \, e^{-\frac{i}{\hbar}q\hat{p}} \, \hat{R} \, e^{\frac{i}{\hbar}q\hat{p}} \, e^{-\frac{i}{\hbar}p\hat{q}} \right| q'' \right\rangle \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}p(q'-q'')} \left\langle q' - q \left| \hat{R} \right| q'' - q \right\rangle \\
&= \frac{1}{2} \, e^{\frac{i}{\hbar}p(q'-q'')} \, \delta\left(q - \frac{q'+q''}{2}\right)
\end{aligned}$$

En comparant cette dernière expression avec (A.12), on constate que

$$\hat{A}(q,p) = \frac{1}{\pi\hbar} \hat{D}(q,p)\hat{R}\hat{D}^\dagger(q,p) \qquad \text{(A.14)}$$

La distriubtion de Wigner peut être vue comme la valeur moyenne d'un opérateur de réflexion translaté.

La fonction de Wigner peut être comparée à une fonction de distribution classique. C'est une fonction réelle, qui vérifie

$$\iint \mathrm{d}q \, \mathrm{d}p \, P_W(q,p) = \mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}\hat{I}\right\} = 1$$

De plus,

$$\int \mathrm{d}q \, \hat{A}_W(q,p) = \frac{1}{2\pi} \int \mathrm{d}\eta \, e^{i\eta(\hat{p}-p)} = |p\rangle\langle p|$$

et

$$\int \mathrm{d}p\, \hat{A}_W(q,p) = |q\rangle\langle q|$$

donc la distribution de Wigner donne des probabilités marginales correctes

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}p\, P_W(q,p) &= \langle q\,|\hat{\rho}|\,q\rangle \\ \int \mathrm{d}q\, P_W(q,p) &= \langle p\,|\hat{\rho}|\,p\rangle \end{aligned}$$

On peut même montrer que

$$\int \mathrm{d}q\,\mathrm{d}p\,\delta(a_1 q + a_2 p - a_3)\, P_W(q,p) = \langle a_3\,|\hat{\rho}|\,a_3\rangle$$

où $|a_3\rangle$ est le vecteur propre de l'opérateur $a_1\hat{q} + a_2\hat{p}$ avec la valeur propre a_3. Dit autrement, l'intégrale de la fonction de Wigner selon une ligne quelconque de l'espace des phases, définie par $a_1 q + a_2 p = a_3$, est égale à la densité de probabilité qu'une mesure de l'observable $a_1\hat{q} + a_2\hat{p}$ donne le résultat a_3.

Le produit scalaire entre deux états $\hat{\rho}_1$ et $\hat{\rho}_2$ peut être calculé grâce à leurs distributions de Wigner

$$\mathrm{Tr}\,\{\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\} = 2\pi\hbar \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}p\, P_{W1}(q,p) P_{W2}(q,p) \tag{A.15}$$

On peut remarquer que si $\hat{\rho}_1$ et $\hat{\rho}_2$ sont orthogonaux, alors

$$\iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}p\, P_{W1}(q,p) P_{W2}(q,p) = 0$$

Pour que cette égalité soit vérifiée, les distributions de Wigner doivent pouvoir prendre des valeurs négatives, ce qui les distingue de vraies distributions de probabilité classique. Les seuls états dont la fonction de Wigner est partout positive sont les états cohérents, avec une distribution gaussienne. Cependant, même si le système est initialement dans un état cohérent, son évolution ultérieure va invariablement conduire à un autre type d'état si le hamiltonien n'est pas quadratique. Plus généralement, on peut montrer qu'il n'existe pas de fonction de distribution bilinéaire partout positive qui donne des probabilités marginales correctes. A condition d'accepter de perdre certaines propriétés incompatibles, on peut néanmoins construire une fonction partout positive : la distribution de Husimi, qui fait l'objet de la section suivante.

A.3 Distribution de Husimi

Supposons pour commencer que le système est un oscillateur harmonique de masse m et de fréquence ω. Les ordres normal et anti-normal sont alors

définis à l'aide des opérateurs annihilation et création

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,(m\omega\hat{q} + i\hat{p}) \\ \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,(m\omega\hat{q} - i\hat{p})\end{aligned}$$

Si on réécrit l'opérateur $\hat{A}(\hat{q},\hat{p})$ en fonction de $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$, l'ordre normal consiste à placer tous les $\hat{a}^\dagger$ à gauche et les $\hat{a}$ à droite. Dans le formalisme précédent, cela revient à prendre comme relation de correspondance

$$e^{i(\xi q+\eta p)} \longleftrightarrow e^{z\hat{a}^\dagger} e^{-z^*\hat{a}}$$

avec

$$z = i\xi\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} - \eta\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \tag{A.16}$$

ou bien encore choisir comme fonction f

$$f_N(\xi,\eta) = e^{\hbar\xi^2/(4m\omega)+\hbar m\omega\eta^2/4} = e^{\frac{|z|^2}{2}} \tag{A.17}$$

L'ordre anti-normal, quant à lui, consiste à placer les $\hat{a}$ avant les $\hat{a}^\dagger$, soit la règle de correspondance

$$e^{i(\xi q+\eta p)} \longleftrightarrow e^{-z^*\hat{a}} e^{z\hat{a}^\dagger}$$

ou la fonction

$$f_{AN}(\xi,\eta) = e^{-\hbar\xi^2/(4m\omega)-\hbar m\omega\eta^2/4} = e^{-\frac{|z|^2}{2}} \tag{A.18}$$

Tout ceci peut s'appliquer également à la description d'un champ électromagnétique, puisqu'il est mathématiquement équivalent à un oscillateur harmonique de masse $m = 1$. Les distributions issues des ordres normal et anti-normal sont de ce fait très utilisées en optique quantique, respectivement sous le nom de fonction P et fonction Q. L'état du champ électromagnétique y est représenté dans un pseudo-espace des phases, où la position q et la quantité de mouvement p sont remplacées par les deux quadratures du champ.

Si le système considéré n'est pas un oscillateur harmonique ni un champ électromagnétique, il reste possible de définir les deux opérateurs $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$ en choisissant arbitrairement le paramètre $m\omega$. On peut ainsi généraliser les ordres normal et anti-normal à n'importe quel système. La distribution de Husimi est construite à partir de cet ordre anti-normal généralisé, et dépend donc d'un paramètre libre dont le rôle sera éclairci par la suite.

En insérant dans l'équation (A.5) le choix de l'ordre anti-normal

$$e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})} f_{AN}(\xi,\eta) = e^{-z^*\hat{a}} e^{z\hat{a}^\dagger}$$

on obtient l'expression dans l'espace des phases (q,p) de la distribution de Husimi

$$P_H(q,p) = \frac{1}{4\pi^2} \iint \mathrm{d}\xi\, \mathrm{d}\eta\, \mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho} e^{-z^*\hat{a}} e^{z\hat{a}^\dagger}\right\} e^{-i(\xi q+\eta p)} \tag{A.19}$$

Cependant, dans ce cas précis il est plus naturel d'exprimer la distribution de Husimi dans l'espace complexe α, l'espace des phases des états cohérents. Un état cohérent $|\alpha\rangle$ est défini par

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

où les $|n\rangle$ sont les vecteurs propres de l'opérateur $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ et α est complexe. Les états cohérents sont les vecteurs propres de l'opérateur annihilation : $\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle$. Ils ne sont pas orthogonaux, mais forment néanmoins une base complète. En effet, en adoptant la convention $\mathrm{d}^2\alpha = \mathrm{d}(\mathrm{Re}\,\alpha)\,\mathrm{d}(\mathrm{Im}\,\alpha)$, et en posant $\alpha = re^{i\theta}$ tel que $\mathrm{d}^2\alpha = r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta$

$$\begin{aligned}
\int \mathrm{d}^2\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| &= \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|m\rangle\langle n|}{\sqrt{m!n!}} \int_0^\infty \mathrm{d}r\, e^{-r^2} r^{m+n+1} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta\, e^{i(m-n)\theta} \\
&= 2\pi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|n\rangle\langle n|}{n!} \underbrace{\int_0^\infty \mathrm{d}r\, e^{-r^2} r^{2n+1}}_{\frac{n!}{2}} = \pi\hat{I}
\end{aligned}$$

D'où on peut développer l'opérateur identité sur la base des $|\alpha\rangle$

$$\hat{I} = \frac{1}{\pi} \int \mathrm{d}^2\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| \tag{A.20}$$

Pour exprimer P_H dans l'espace des α, on effectue le changement de variable

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega q + ip) \tag{A.21}$$

Comme $\mathrm{d}^2\alpha = \frac{1}{2\hbar}\mathrm{d}q\,\mathrm{d}p$ et, par normalisation

$$\iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}p\, P_H(q,p) = \iint \mathrm{d}^2\alpha\, P_H(\alpha) = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}) = 1$$

on a $P_H(\alpha) = 2\hbar P_H(q,p)$.

En utilisant (A.21) et (A.16), on peut alors réécrire (A.19), en remarquant que $\mathrm{d}^2 z = \frac{\hbar}{2}\,\mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta$

$$P_H(\alpha) = \frac{1}{\pi^2}\iint \mathrm{d}^2 z\,\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho} e^{-z^*\hat{a}} e^{z\hat{a}^\dagger}\right\} e^{z^*\alpha - z\alpha^*}$$

Soit

$$\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho} e^{-z^*\hat{a}} e^{z\hat{a}^\dagger}\right\} = \iint \mathrm{d}^2\alpha\, e^{z\alpha^* - z^*\alpha}\, P_H(\alpha)$$

Par ailleurs, en insérant (A.20) dans le membre de gauche de cette équation on obtient

$$\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho} e^{-z^*\hat{a}} \hat{I} e^{z\hat{a}^\dagger}\right\} = \frac{1}{\pi}\iint \mathrm{d}^2\alpha\, e^{z\alpha^* - z^*\alpha}\ \langle\alpha\,|\hat{\rho}|\,\alpha\rangle$$

En comparant ces deux dernière équation, on en déduit

$$P_H(\alpha) = \frac{1}{\pi}\,\langle\alpha\,|\hat{\rho}|\,\alpha\rangle$$

Pour un état mixte quelconque

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i\,|\psi_i\rangle\,\langle\psi_i| \ \text{ avec } 0 \le p_i \le 1$$

On a

$$P_H(\alpha) = \frac{1}{\pi}\sum_i p_i\,|\langle\alpha\,|\,\psi\rangle|^2$$

On en tire l'inégalité suivante

$$0 \le P_H(\alpha) \le \frac{1}{\pi}$$

En repassant dans l'espace des phases standard (q,p), P_H a pour expression

$$P_H(q,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\,\langle\alpha_{q,p}\,|\hat{\rho}|\,\alpha_{q,p}\rangle \tag{A.22}$$

avec

$$0 \le P_H(q,p) \le \frac{1}{2\pi\hbar}$$

Ici, $|\alpha_{q,p}\rangle$ désigne l'état cohérent centré en q et en p, soit l'état $|\alpha\rangle$ avec $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega q + ip)$. Dans la représentation des positions, $|\alpha_{q,p}\rangle$ a pour expression

$$\langle x\,|\,\alpha_{q,p}\rangle = \alpha_{q,p}(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-q)^2} e^{i\frac{px}{\hbar}}$$

D'où, pour un état pur $\hat{\rho} = |\psi\rangle\,\langle\psi|$

$$P_H(q,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\left|\int \mathrm{d}x\,\alpha^*_{q,p}(x)\,\psi(x)\right|^2$$

On peut constater que la distribution de Husimi est réelle (comme la distribution de Wigner), mais surtout partout positive. Cela lui permet d'être plus facilement comparée à une distribution de probabilité classique. Néanmoins, elle n'en partage pas toutes les propriétés ; par exemple, les probabilités marginales, qui étaient exactes dans le cas de la fonction de Wigner, ne le sont plus.

Dans le cas de la distribution de Husimi, l'opérateur point de l'espace des phases prend une expression très simple. D'après (A.22)

$$P_H(q,p) = \mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}\,\frac{1}{2\pi\hbar}\,|\alpha_{q,p}\rangle\langle\alpha_{q,p}|\right\}$$

Ce qui donne l'opérateur

$$\hat{A}_H(q,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\,|\alpha_{q,p}\rangle\langle\alpha_{q,p}|$$

Par contre, contrairement au cas de la distribution de Wigner, ces opérateurs ne sont pas orthogonaux entre eux

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\left\{\hat{A}_H(q,p)\hat{A}_H(q',p')\right\} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2}\,|\langle\alpha_{q,p}\,|\,\alpha_{q',p'}\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2}\,e^{-|\alpha_{q,p}-\alpha_{q',p'}|^2}\end{aligned}$$

A.4 Relation entre les distributions de Wigner et de Husimi

La distribution de Husimi peut également être construite à partir de la distribution de Wigner en lissant celle-ci par une gaussienne. En effet, si l'on revient à la définition (A.5)

$$\begin{aligned}P_H(q,p) &= \frac{1}{4\pi^2}\iint \mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta\,\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}(\hat{q},\hat{p})e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}f_H(\xi,\eta)\right\}e^{-i(\xi q+\eta p)} \\ &= \frac{1}{4\pi^2}\iint \mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta\,\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}(\hat{q},\hat{p})e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}f_W(\xi,\eta)\right\}\frac{f_H(\xi,\eta)}{f_W(\xi,\eta)}\,e^{-i(\xi q+\eta p)}\end{aligned}$$

avec $f_W(\xi,\eta) = 1$ et $f_{AN}(\xi,\eta) = e^{-\hbar\xi^2/(4m\omega)-\hbar m\omega\eta^2/4}$. Or, d'après (A.4)

$$\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}e^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})}f_W(\xi,\eta)\right\} = \iint \mathrm{d}q'\,\mathrm{d}p'\,e^{i(\xi q'+\eta p')}P_W(q',p')$$

D'où

$$P_H(q,p) = \iint \mathrm{d}q'\,\mathrm{d}p'\,g(q'-q,p'-p)\,P_W(q',p')$$

avec

$$g(q,p) = \frac{1}{4\pi^2}\iint \mathrm{d}\xi\,\mathrm{d}\eta\,e^{i(\xi q+\eta p)}\frac{f_H(\xi,\eta)}{f_W(\xi,\eta)}$$

On en déduit

$$P_H(q,p) = \frac{1}{\pi\hbar} \iint \mathrm{d}q' \, \mathrm{d}p' \, e^{-\frac{m\omega}{\hbar}(q'-q)^2 - \frac{1}{\hbar m\omega}(p'-p)^2} P_W(q',p') \tag{A.23}$$

La distribution de Husimi n'est donc rien d'autre que le lissage de la distribution de Wigner par une gaussienne pour éliminer les fluctuations rapides. La gaussienne utilisée correspond à un paquet d'onde d'incertitude minimale, c'est-à-dire que ses écarts-type σ_q et σ_p vérifient $\sigma_q\sigma_p = \frac{\hbar}{2}$ (car ${\sigma_q}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$ et ${\sigma_p}^2 = \frac{\hbar m\omega}{2}$). En fait, on peut montrer que le lissage gaussien de la distribution de Wigner donne des fonctions partout positives dès que $\sigma_q\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$. Il faut remarquer en outre qu'aucune information essentielle n'est perdue lors de cette opération, puisque l'on peut reconstruire exactement la fonction d'onde à partir de la distribution de Husimi.

A.5 Distribution de Wigner discrète

On cherche maintenant à trouver l'équivalent de la distribution de Wigner continue pour un espace de Hilbert discret et fini [21, 69, 98]. Pour cela, on commence par introduire la base $|n\rangle$ (avec n variant de 0 à $N-1$), que l'on identifie arbitrairement comme la base des positions. Pour s'accommoder de la taille finie N de l'espace de Hilbert, on choisit des conditions aux limites périodiques $|n+N\rangle = |n\rangle$. L'interprétation de la base $|n\rangle$ comme celle d'une position est purement formelle et peut parfaitement ne pas correspondre à une observable physique. Par exemple dans le cas d'un ordinateur quantique, on peut choisir la base naturelle qui ne correspond pas à une position dans une implémentation réelle. On introduit également la base des moments conjugués $|k\rangle$, avec $k = 0, \ldots, N-1$, qui s'obtient à partir de la base $|n\rangle$ par

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{i2\pi\frac{nk}{N}} \, |n\rangle$$

Ainsi, comme dans le cas continu, la position et le moment sont reliés par une transformée de Fourier. Par contre, les opérateurs position et moment que l'on pourrait définir par $\hat{Q} = \sum_n n \, |n\rangle\langle n|$ et $\hat{P} = \sum_k k \, |k\rangle\langle k|$ ne sont plus canoniquement conjugués. Leur commutateur n'est en effet pas proportionnel à l'identité, et l'on peut montrer plus généralement qu'il est impossible de trouver deux opérateurs qui vérifient cette propriété dans un espace de Hilbert de dimension finie. Il est donc plus judicieux de définir la distribution de Wigner discrète à l'aide des opérateurs de translation. Avant de les aborder, il est important de remarquer que la taille de l'espace de Hilbert est reliée à une constante de Planck effective. Si l'on considère un système continu dont la position et le moment sont tous deux périodiques de période 2π, alors seul un nombre fini N d'états ont une amplitude non nulle, et l'on peut les indexer par n et k : $q = 2\pi\frac{n}{N}$ et $p = 2\pi\frac{k}{N}$ (voir page 50 et figure

3.4). Or, comme q est 2π-périodique, on a également $p = k\hbar$, ce qui donne $N = \frac{2\pi}{\hbar}$. N joue donc le rôle de l'inverse d'une constante de Planck, et la limite de grand N correspond à une limite semi-classique.

Une fois les bases des positions et des moments définies, on peut construire les opérateurs de translation. Même si la notion de translation infinitésimale n'a ici pas de sens, on peut néanmoins définir les opérateurs de translation finie $\hat{U}$ et $\hat{V}$, qui génèrent des translations finies en position et en moment respectivement.

$$\begin{aligned} \hat{U}^m |n\rangle &= |n+m\rangle & \hat{V}^m |k\rangle &= |k+m\rangle \\ \hat{U}^m |k\rangle &= e^{-i2\pi\frac{mk}{N}} |k\rangle & \hat{V}^m |n\rangle &= e^{i2\pi\frac{mn}{N}} |n\rangle \end{aligned}$$

Ces opérateurs vérifient la relation de commutation

$$\hat{V}^p\hat{U}^q = \hat{U}^q\hat{V}^p e^{i2\pi\frac{qp}{N}} \tag{A.24}$$

À l'aide de ces opérateurs, on est en mesure de trouver un équivalent discret à l'opérateur de translation continue dans l'espace des phases (A.13)

$$\hat{D}(q,p) = e^{-\frac{i}{\hbar}(q\hat{p}-p\hat{q})} = e^{-i\frac{q\hat{p}}{\hbar}}\, e^{i\frac{p\hat{q}}{\hbar}}\, e^{i\frac{pq}{2\hbar}}$$

En identifiant les opérateurs de déplacement correspondants, on définit l'analogue discret de $\hat{D}(q,p)$ par

$$\hat{T}(q,p) = \hat{U}^q\hat{V}^p e^{i\pi\frac{qp}{N}} \tag{A.25}$$

On définit enfin un dernier opérateur $\hat{R}$, qui agit comme une réflexion dans la base des positions (ou des moments), selon $\hat{R}|n\rangle = |-n\rangle$. Il vérifie les lois de commutation suivantes avec les opérateurs de translation

$$\begin{aligned} \hat{U}\hat{R} &= \hat{R}\hat{U}^{-1} \\ \hat{V}\hat{R} &= \hat{R}\hat{V}^{-1} \end{aligned}$$

Pour construire une fonction de Wigner discrète, le plus simple est de trouver une version discrète de l'opérateur point de l'espace des phases $\hat{A}(q,p)$. On cherche donc une base de l'espace des opérateurs hermitiens ; comme l'espace de Hilbert est de dimension N, une telle base doit avoir N^2 éléments. Par analogie avec l'expression (A.14) pour $\hat{A}(q,p)$ dans le cas continu, on peut être tenté de définir l'opérateur équivalent dans le cas discret par

$$\hat{A}(q,p) = \frac{2}{N}\,\hat{T}(q,p)\hat{R}\hat{T}^\dagger(q,p)$$

Cet opérateur est bien hermitien par construction. Cependant, la base ainsi construite n'est pas assez grande. Pour le voir, on réécrit $\hat{A}$ en utilisant la relation de commutation (A.24)

$$\hat{A}(q,p) = \frac{1}{N}\,\hat{U}^{2q}\hat{R}\hat{V}^{-2p}\, e^{i4\pi\frac{qp}{N}}$$

Comme $\hat{U}$ et $\hat{V}$ sont des opérateurs cycliques de période N, on a la relation $\hat{A}(q+\frac{N}{2},p) = \hat{A}(q,p)$ et de même pour p. Cela signifie que lorsque q et p varient entre 0 et $N-1$, seulement $\frac{N}{2} \times \frac{N}{2} = \frac{N^2}{4}$ opérateurs indépendants sont engendrés.

Pour résoudre ce problème, il suffit de définir les opérateurs point de l'espace des phases sur un réseau deux fois plus grand ($2N \times 2N$) afin d'obtenir $4N^2$ opérateurs, dont N^2 indépendants. On adopte ainsi la définition suivante, avec q et p variant entre 0 et $2N-1$

$$\hat{A}(q,p) = \frac{1}{2N}\,\hat{U}^q \hat{R} \hat{V}^{-p}\, e^{i\pi\frac{qp}{N}} \tag{A.26}$$

On peut montrer aisément que

$$\hat{A}(q+\sigma_q N, p+\sigma_p N) = \hat{A}(q,p)(-1)^{\sigma_p q + \sigma_q p + \sigma_q \sigma_p N}$$

avec $\sigma_q, \sigma_p = 0, 1$. Cela signifie que les N^2 opérateurs correspondant au sous-réseau $q, p = 0, \ldots, N$ de l'espace des phases déterminent tous les autres. D'autre part, les $\hat{A}(q,p)$ forment une base complète de ce sous-réseau. En effet, on a

$$\mathrm{Tr}\left\{\hat{A}(q,p)\hat{A}(q',p')\right\} = \frac{1}{4N}\,\delta_N(q'-q)\,\delta_N(p'-p) \tag{A.27}$$

avec q, q', p et p' variant entre 0 et N, et $\delta_N(q) = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} e^{i2\pi q/N}$ est la fonction delta périodique qui est nulle sauf si $q = 0 \bmod N$.

On peut maintenant définir la fonction de Wigner discrète par

$$P_W(q,p) = \mathrm{Tr}\left\{\hat{A}(q,p)\hat{\rho}\right\} \tag{A.28}$$

avec $q, p = 0, \ldots, N$. De la même manière que les $\hat{A}(q,p)$ ne sont pas tous indépendants, la fonction de Wigner discrète obéit à la relation

$$P_W(q+\sigma_q N, p+\sigma_p N) = P_W(q,p)(-1)^{\sigma_p q + \sigma_q p + \sigma_q \sigma_p N}$$

Comme les opérateurs $\hat{A}$ forment une base du premier sous-réseau $N \times N$, on peut inverser la définition (A.28) et développer la matrice densité sur cette base

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= 4N \sum_{q,p=0}^{N-1} P_W(q,p)\hat{A}(q,p) \\ &= N \sum_{q,p=0}^{2N-1} P_W(q,p)\hat{A}(q,p)\end{aligned}$$

La dernière égalité est obtenue en remarquant que les contributions provenant des 4 réseaux $N \times N$ sont identiques.

La distribution de Wigner discrète ainsi définie possède les mêmes propriétés que la distribution continue. En effet, W est réel car $\hat{A}$ est hermitien par construction. De plus, d'après (A.27) on a

$$\mathrm{Tr}\,\{\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2\} = N \sum_{q,p=0}^{2N-1} P_{W1}(q,p)P_{W2}(q,p)$$

Enfin, on peut montrer qu'on obtient les probabilités marginales correctes en sommant la fonction de Wigner selon q ou p

$$\sum_{q=0}^{2N-1} P_W(q,p) = \langle p\,|\hat{\rho}|\,p\rangle$$
$$\sum_{p=0}^{2N-1} P_W(q,p) = \langle q\,|\hat{\rho}|\,q\rangle$$

A.6 Distribution de Husimi discrète

De même, on peut trouver un équivalent discret à la fonction de Husimi [73]. Dans le cas discret avec des conditions aux limites périodiques, l'état cohérent centré en $(0,0)$ s'écrit

$$|\alpha_{0,0}\rangle = \gamma \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\pi\omega}{N}(Nj+n)^2}\,|n\rangle$$

(on a pris ici $m = 1$). Le facteur de normalisation γ n'a pas d'expression générale simple, mais pour N grand, le recouvrement entre les différentes gaussiennes devient rapidement très faible, et on peut alors approximer γ avec une bonne précision par

$$\gamma = \sqrt[4]{\frac{2\omega}{N}}$$

On obtient les autres états cohérents centrés en (q,p) grâce à l'opérateur de translation finie (A.25)

$$\begin{aligned} |\alpha_{q,p}\rangle &= \hat{T}(q,p)\,|\alpha_{0,0}\rangle \\ &= \gamma \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\pi\omega}{N}(Nj+n-q)^2} e^{-i\frac{2\pi}{N}p(\frac{q}{2}-n)}\,|n\rangle \end{aligned}$$

De la même manière que dans le cas continu, la distribution de Husimi discrète est alors définie par

$$P_H(q,p) = \frac{1}{N}\mathrm{Tr}\,\{|\alpha_{q,p}\rangle\langle\alpha_{q,p}|\,\hat{\rho}\} \tag{A.29}$$

Pour un état pur $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, cela donne (avec $|\psi\rangle$ exprimée dans la représentation des positions)

$$P_H(q,p) = \sqrt{\frac{2\omega}{N^3}} \left| \sum_{j=-\infty}^{\infty} \sum_{n=0}^{N-1} \psi(n)\, e^{-\frac{\pi\omega}{N}(Nj+n-q)^2} e^{i\frac{2\pi}{N}pn} \right|^2$$

Le facteur ω peut être interprété simplement comme le rapport $\frac{\Delta_p}{\Delta_q}$ entre l'extension de l'état cohérent selon p et selon q, avec Δ_q et Δ_p exprimés en nombre d'états. Les écarts-types σ_q et σ_p définis page 116, qui sont exprimés en unités d'espace des phases, s'obtiennent à partir des précédents par $\sigma_q = \frac{2\pi c_q}{N}\Delta_q$ et $\sigma_p = \frac{2\pi c_p}{N}\Delta_p$ (on suppose ici que l'espace des phases a pour extension $2\pi c_q \times 2\pi c_p$). Si $c_q = c_p$, alors $\omega = \frac{\Delta_p}{\Delta_q} = \frac{\sigma_p}{\sigma_q}$, comme c'est le cas pour le choix usuel $2\pi \times 2\pi$. Dans le cas contraire, on a $\omega = \frac{\sigma_p c_q}{\sigma_q c_p}$. Si l'on souhaite avoir un paquet d'onde symétrique dans une cellule $2\pi \times 2\pi$ de l'espace des phases ($\sigma_p = \sigma_q$), on doit donc prendre $\omega = \frac{c_q}{c_p}$ (voir par exemple la figure A.1).

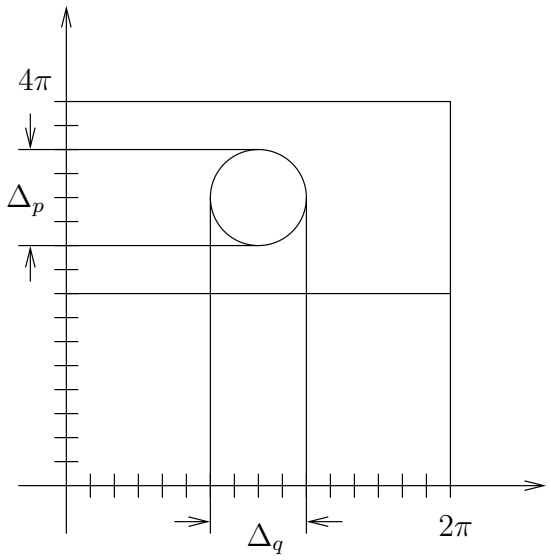


FIG. A.1 – État cohérent dans un espace des phases $2\pi \times 4\pi$. Ici, $\omega = \frac{\Delta_p}{\Delta_q} = 1$ mais $\frac{\sigma_p}{\sigma_q} = 2$.

Bibliographie

[1] D. S. Abrams et S. Lloyd. *Simulation of many-body fermi systems on a universal quantum computer.* Phys. Rev. Lett. **79**, 2586–2589 (1997).

[2] H. Ammann, R. Gray, I. Shvarchuck et N. Christensen. *Quantum delta-kicked rotor : Experimental observation of decoherence.* Phys. Rev. Lett. **80**, 4111 (1998).

[3] P. W. Anderson. *Absence of diffusion in certain random lattices.* Phys. Rev. **109**, 1492–1505 (1958).

[4] R. Artuso, F. Borgonovi, I. Guarneri, L. Rebuzzini et G. Casati. Phys. Rev. Lett. **69**, 3302 (1992).

[5] R. Artuso, F. Borgonovi, I. Guarneri, L. Rebuzzini et G. Casati. Int. Jour. Mod. Phys. B **8**, 207 (1994).

[6] R. Artuso, G. Casati et D. L. Shepelyansky. Phys. Rev. Lett. **68**, 3826 (1992).

[7] A. Barelli, J. Bellissard et R. Rammal. J. Phys. France **51**, 2167 (1990).

[8] A. Barelli et C. Kreft. J. Phys. I France **1**, 1229 (1991).

[9] A. Barenco, C. H. Bennett, R. Cleve, D. P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. Smolin et H. Weinfurter. *Elementary gates for quantum computation.* Phys. Rev. A **52**, 3457–3467 (1995), quant-ph/9503016.

[10] G. Benenti, G. Casati, S. Montangero et D. L. Shepelyansky. *Efficient quantum computing of complex dynamics.* Phys. Rev. Lett. **87**, 227901 (2001).

[11] G. Benenti, G. Casati et G. Strini. *Principles of Quantum Computation and Information.* World Scientific (2004).

[12] P. Benioff. *Quantum mechanical models of turing machines that dissipate no energy.* Phys. Rev. Lett. **48**, 1581–1585 (1982).

[13] C. H. Bennett, E. Bernstein, G. Brassard et U. Vazirani. *Strengths and weaknesses of quantum computing.* SIAM J. Comput. **26**, 1510–1523 (1997), quant-ph/9701001.

[14] F. Borgonovi et D. L. Shepelyansky. Europhysics Letters **29**, 117 (1995).

[15] F. Borgonovi et D. L. Shepelyansky. *Enhancement of localization length for two interacting kicked rotators.* Nonlinearity **8**, 877 (1995).

[16] M. Boyer, G. Brassard, P. Høyer et A. Tapp. *Tight bounds on quantum searching.* Fortsch. Phys. **46**, 493–505 (1998).

[17] G. Brassard et P. Høyer. Dans *Proceedings of Fifth Israeli Symposium on Theory of Computing and Systems*, pages 12–23. IEEE Computer Society, Los Alamitos, CA (1997).

[18] G. Brassard, P. Høyer, M. Mosca et A. Tapp. Dans Jr. S. J. Lomonaco et H. E. Brandt, éditeurs, *Quantum Computation and Quantum Information : A Millennium Volume* (2002), AMS, Contemporary Mathematics Series Vol. 305, quant-ph/0005055.

[19] G. Casati, B. V. Chirikov, J. Ford et F. M. Izrailev. Lecture Notes in Physics **93**, 334 (1979).

[20] G. Casati, I. Guarneri et D. L. Shepelyansky. IEEE Jour. of Quant. Elect. **24**, 1420 (1988).

[21] S. Chang et K. Shi. *Evolution and exact eigenstates of a resonant quantum system.* Phys. Rev. A **34**, 7–22 (1986).

[22] A. D. Chepelianskii et D. L. Shepelyansky. *Simulation of chaos-assisted tunneling in a semiclassical regime on existing quantum computers.* Phys. Rev. Lett. **66**, 054301 (2002).

[23] B. V. Chirikov. At. Energ. **6**, 630 (1959), [Engl. Trans., J. Nucl. Energy Part C : Plasma Phys. **1**, 253 (1960)].

[24] B. V. Chirikov. *Research concerning the theory of nonlinear resonance and stochasticity.* Preprint N 267, Institute of Nuclear Physics, Novosibirsk (1969), [Engl. Trans., CERN Trans. 71-40 (1971)].

[25] B. V. Chirikov. *A universal instability of many-dimensional oscillator systems.* Physics Reports **52**, 263–379 (1979).

[26] B. V. Chirikov. *Time-dependent quantum systems.* Dans M.-J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin, éditeurs, *Chaos and Quantum Physics*, pages 443–545. North-Holland (1989), Les Houches Summer School Lectures, Session LII, 1989.

[27] B. V. Chirikov, F. M. Izrailev et D. L. Shepelyansky. *Dynamical stochasticity in classical and quantum mechanics.* Sov. Sci. Rev. C **2**, 209 (1981).

[28] D. Coppersmith. *An approximate fourier transform useful in quantum factoring.* IBM Research Report RC 19642 (1994).

[29] D. Deutsch. *Quantum theory, the church-turing principle and the universal quantum computer.* Proc. R. Soc. Lond. A **400**, 97 (1985).

[30] D. P. DiVincenzo. *Two-bit gates are universal for quantum computation.* Phys. Rev. A **51**, 1015–1022 (1995).

[31] J. Emerson, S. Lloyd, D. Poulin et D. Cory. *Estimation of the local density of states on a quantum computer.* Phys. Rev. A **69**, 050305 (2004).

[32] J. Emerson, Y. S. Weinstein, S. Lloyd et D. G. Cory. *Fidelity decay as an efficient indicator of quantum chaos.* Phys. Rev. Lett. **89**, 284102 (2002).

[33] S. N. Evangelou et J.-L. Pichard. Phys. Rev. Lett. **84**, 1643 (2000).

[34] R. P. Feynman. *Simulating physics with computers.* Int. J. Theor. Phys. **21**, 467–488 (1982).

[35] R. P. Feynman. *Quantum mechanical computers.* Found. Phys. **16**, 507–531 (1986).

[36] S. Fishman, D. R. Grempel et R. E. Prange. *Chaos, quantum recurrences, and anderson localization.* Phys. Rev. Lett. **49**, 509–512 (1982).

[37] K. Frahm, A. Müller-Groeling. J.-L. Pichard et D. Weinmann. *Scaling in interaction-assisted coherent transport.* Europhys. Lett. **31**, 169 (1995).

[38] K. M. Frahm, R. Fleckinger et D. L. Shepelyansky. *Quantum chaos and random matrix theory for fidelity decay in quantum computations with static imperfections.* Eur. Phys. J. D **29**, 139–155 (2004).

[39] H. Furstenberg. Trans. Ann. Math. Soc. **108**, 377 (1963).

[40] T. Geisel, R. Ketzmerick et G. Petschel. Phys. Rev. Lett. **66**, 1651 (1991).

[41] B. Georgeot et D. L. Shepelyansky. *Emergence of quantum chaos in the quantum computer core and how to manage it.* Phys. Rev. E **62**, 6366–6375 (2000).

[42] B. Georgeot et D. L. Shepelyansky. *Quantum chaos border for quantum computing.* Phys. Rev. E **62**, 3504–3507 (2000).

[43] B. Georgeot et D. L. Shepelyansky. *Exponential gain in quantum computing of quantum chaos and localization.* Phys. Rev. Lett. **86**, 2890 (2001).

[44] B. Georgeot et D. L. Shepelyansky. *Stable quantum computation of unstable classical chaos.* Phys. Rev. Lett. **85**, 5393 (2001).

[45] D. Gottesman. *Stabilizer Codes and Quantum Error Correction.* Thèse de Doctorat, California Institute of Technology, Pasadena (1997), quant-ph/9705052.

[46] D. R. Grempel, R. E. Prange et S. Fishman. *Quantum dynamics of a nonintegrable system.* Phys. Rev. A **29**, 1639–1647 (1984).

[47] L. K. Grover. *A fast quantum mechanical algorithm for database search.* Dans *Proc. of the 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC)*, pages 212–219 (1996).

[48] L. K. Grover. *Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack.* Phys. Rev. Lett. **79**, 325–328 (1997).

[49] F. Haake. *Quantum Signatures of Chaos.* Springer (1992).

[50] P. G. Harper. *Single band motion of conduction electrons in a uniform magnetic field.* Proc. Phys. Soc. A **68**, 874–878 (1955).

[51] M. Hillery, R. F. O'Connell, M. O. Scully et E. P. Wigner. *Distribution functions in physics : Fundamentals.* Physics Reports **106**, 121–167 (1984).

[52] D. R. Hofstadter. *Energy levels and wave functions of bloch electrons in rational and irrational magnetic fields.* Phys. Rev. B **14**, 2239–2249 (1976).

[53] Y. Imry. *Coherent propagation of two interacting particles in a random potential.* Europhys. Lett. **30**, 405 (1995).

[54] F. M. Izrailev. *Simple models of quantum chaos : spectrum and eigenfunctions.* Physics Reports **196**, 299–392 (1990).

[55] O. Kern, G. Alber et D. L. Shepelyansky. *Quantum error correction of coherent errors by randomization* (2004), quant-ph/0407262.

[56] R. Ketzmerick, K. Kruse et T. Geisel. Phys. Rev. Lett. **80**, 137 (1998).

[57] A. Y. Kitaev. *Quantum measurements and the abelian stabilizer problem* (1995), quant-ph/9511026.

[58] A. Y. Kitaev. *Quantum computations : algorithms and error correction.* Russ. Math. Surv. **52**, 1191–1249 (1997).

[59] P. M. Koch et K. A. H. van Leeuwen. Phys. Rep. **255**, 289 (1995).

[60] A. N. Kolmogorov. Dokl. Akad. Nauk. SSSR **98**, 527 (1954).

[61] P. Leboeuf, J. Kurchan, M. Feingold et D. P. Arovas. Phys. Rev. Lett. **65**, 3076 (1990).

[62] H.-W. Lee. *Theory and application of the quantum phase-space distribution functions.* Physics Reports **259**, 147–211 (1995).

[63] B. Lévi et B. Georgeot. *Quantum computation of a complex system : The kicked Harper model.* Phys. Rev. E **70**, 056218 (2004), quant-ph/0409028.

[64] B. Lévi, B. Georgeot et D. L. Shepelyansky. *Quantum computing of quantum chaos in the kicked rotator model.* Phys. Rev. E **67**, 046220 (2003), quant-ph/0210154.

[65] A. Lichtenberg et M. Lieberman. *Regular and Chaotic Dynamics.* Springer, New York (1992).

[66] D. A. Lidar et O. Biham. *Simulating ising spin glasses on a quantum computer.* Phys. Rev. E **56**, 3661–3681 (1997).

[67] R. Lima et D. L. Shepelyansky. Phys. Rev. Lett. **67**, 1377 (1991).

[68] S. Lloyd. *Universal quantum simulators.* Science **273**, 1073 (1996).

[69] C. Miquel, J. P. Paz et M. Saraceno. *Quantum computers in phase space.* Phys. Rev. A **65**, 062309 (2002).

[70] F. L. Moore, J. C. Robinson, C. F. Bharucha, B. Sundaram et M. G. Raizen. *Atom optics realization of the quantum delta-kicked rotor.* Phys. Rev. Lett. **75**, 4598 (1995).

[71] M. A. Nielsen et I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information.* Cambridge University Press, New York (2000).

[72] G. Ortiz, J. E. Gubernatis, E. Knill et R. Laflamme. *Quantum algorithms for fermionic simulations.* Phys. Rev. A **64**, 022319 (2001).

[73] J. P. Paz, A. J. Roncaglia et M. Saraceno. *Quantum algorithms for phase-space tomography.* Phys. Rev. A **69**, 032312 (2004).

[74] A. A. Pomeransky et D. L. Shepelyansky. *Quantum computation of the anderson transition in the presence of imperfections.* Phys. Rev. A **69**, 014302 (2004).

[75] J. Preskill. *Quantum Computation and Information.* California Institute of Technology (1998), http://www.theory.caltech.edu/people/-preskill/ph229/.

[76] T. Prosen, I. I. Satija et N. Shah. Phys. Rev. Lett. **87**, 066601 (2001).

[77] L. E. Reichl. *The Transition to Chaos.* Springer-Verlag (1992).

[78] R. Schack. *Using a quantum computer to investigate quantum chaos.* Phys. Rev. A **57**, 1634 (1998).

[79] T. Schlösser, K. Ensslin, J. P. Kotthaus et M. Holland. *Experimental observation of an artificial bandstructure in lateral superlattices.* Dans Montambaux Martin et Trân Thanh Vân, éditeurs, *Correlated Fermions and Transport in Mesoscopic Systems*, page 423. Frontières (1996).

[80] D. L. Shepelyansky. *Localization of quasienergy eigenfunctions in action space.* Phys. Rev. Lett. **56**, 677 (1986).

[81] D. L. Shepelyansky. *Localization of diffusive excitation in multi-level systems.* Physica D **28**, 103 (1987).

[82] D. L. Shepelyansky. *Coherent propagation of two interacting particles in a random potential.* Phys. Rev. Lett. **73**, 2607–2610 (1994).

[83] P. W. Shor. *Algorithms for quantum computation : discrete logarithms and factoring.* Dans *Proc. of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, pages 124–134 (1994).

[84] P. W. Shor. *Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory.* Phys. Rev. A **52**, 2493 (1995).

[85] P. W. Shor. *Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer.* SIAM J. Comput. **26**, 1484–1509 (1997), quant-ph/9508027.

[86] P. H. Song et D. L. Shepelyansky. *Quantum computing of quantum chaos and imperfection effects.* Phys. Rev. Lett. **86**, 2162–2165 (2001).

[87] A. Sørensen et K. Mølmer. *Spin-spin interaction and spin squeezing in an optical lattice.* Phys. Rev. Lett. **83**, 2274–2277 (1999).

[88] A. M. Steane. *Error correcting codes in quantum theory.* Phys. Rev. Lett. **77**, 793 (1996).

[89] A. M. Steane. *Quantum computing.* Rep. Prog. Phys. **61**, 117 (1998).

[90] H.-J. Stöckmann. *Quantum Chaos, an introduction.* Cambridge University Press (1999).

[91] V. I. Tatarskii. *The wigner representation of quantum mechanics.* Sov. Phys. Usp. **26**, 311–327 (1983).

[92] F. von Oppen, T. Wettig et J. Müller. *Interaction-induced delocalization of two particles in a random potential : Scaling properties.* Phys. Rev. Lett. **76**, 491–494 (1996).

[93] D. Weinmann, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard et K. Frahm. *$h/2e$ oscillations for correlated electron pairs in disordered mesoscopic rings.* Phys. Rev. Lett. **75**, 1598–1601 (1995).

[94] Y. S. Weinstein, S. Lloyd, J. Emerson et D. G. Cory. *Experimental implementation of the quantum baker's map.* Phys. Rev. Lett. **89**, 157902 (2002).

[95] S. Wiesner. *Simulations of many-body quantum systems by a quantum computer* (1996), quant-ph/9603028.

[96] E. Wigner. *On the quantum correction for thermodynamic equilibrium.* Phys. Rev. **40**, 749–759 (1932).

[97] M. Wilkinson et R. J. Kay. Phys. Rev. Lett. **76**, 1896 (1996).

[98] W. K. Wootters. *A wigner-function formulation of finite-state quantum mechanics.* Annals of Physics **176**, 1–21 (1987).

[99] C. Zalka. *Efficient simulation of quantum systems by quantum computers.* Fortschr. Phys. **46**, 877 (1998).