

Une méthode de tomographie de processus quantique unitaire fondée sur une diagonalisation de matrice densité

Yannick DEVILLE¹ Alain DEVILLE²

¹Université de Toulouse, CNRS, CNES, OMP, IRAP (Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie), F-31400 Toulouse, France

²Aix-Marseille Université, CNRS, IM2NP UMR 7334, F-13397 Marseille, France

Résumé – Les méthodes de Tomographie de Processus Quantique (TPQ) ont pour but d’identifier, c.-à-d. estimer, un processus quantique. La TPQ est un outil majeur de traitement de l’information quantique, en particulier parce qu’il permet de caractériser expérimentalement le comportement réel des portes quantiques, qui peuvent être utilisées comme briques de base des ordinateurs quantiques. Nous considérons ici des processus unitaires (possiblement denses, c.-à-d. sans contraintes de parcimonie), ce qui correspond à des systèmes isolés. De plus, nous développons une méthode de TPQ applicable à un nombre significatif de qubits et donc à un espace des états de grande dimension, ce qui permet de traiter des problèmes plus complexes. L’utilisation du caractère unitaire du processus nous permet de proposer une méthode qui réalise tout d’abord une partie de la TPQ en diagonalisant la matrice densité estimée d’une sortie de processus. On achève ensuite la TPQ en utilisant un autre état différemment. La pertinence de notre méthode est validée à l’aide de simulations.

Abstract – Quantum Process Tomography (QPT) methods aim at identifying, i.e. estimating, a quantum process. QPT is a major quantum information processing tool, since it especially allows one to experimentally characterize the actual behavior of quantum gates, that may be used as the building blocks of quantum computers. We here consider unitary (possibly dense, i.e. without sparsity constraints) processes, which corresponds to isolated systems. Moreover, we develop a QPT method applicable to a significant number of qubits and hence to a high state space dimension, which allows one to tackle more complex problems. Using the unitarity of the process allows us to propose a method that first achieves part of QPT by performing an eigenanalysis of the estimated density matrix of a process output. We then complete the QPT by using another state differently. The relevance of our method is validated by means of simulations.

1 Introduction

Dans le cadre classique, c.-à-d. non quantique, une fonctionnalité majeure de traitement du signal est l’identification de système [11]. Elle a été étendue au cadre quantique sous le nom de Tomographie de Processus Quantique (TPQ) [13]. Elle est d’une grande importance car elle permet en particulier de caractériser le comportement réel des portes quantiques, qui sont largement utilisées comme briques de base d’ordinateurs quantiques. De nombreuses méthodes de TPQ ont été développées pour le cas général de processus représentés par des transformations non-unitaires, correspondant à des systèmes ouverts. Au contraire, quelques méthodes d’estimation ou apprentissage de processus quantiques se focalisent sur le cas de processus unitaires, qui correspondent à des systèmes isolés et au formalisme des portes quantiques (voir [1, 15, 10, 16, 8, 7, 6, 17]).

Dans cet article, nous proposons un autre type de méthode de TPQ dédiée aux processus unitaires, avec en plus comme objectif de pouvoir traiter un nombre q de qubits significatif et donc une dimension $d = 2^q$ d’espace des états élevée (alors qu’au contraire les tests présentés dans [1] se limitent à $d = 5$). En particulier, notre méthode tire parti des propriétés de la diagonalisation d’une matrice de données, qui est une estimée d’une matrice densité. Elle possède ainsi certaines similitudes avec des méthodes à diagonalisation développées dans le cadre classique pour traiter des problèmes voisins d’identification de mélange et de séparation aveugle de sources

(SAS), telles que la méthode de SAS appelée SOBI [2] (pour “Second-Order Blind Identification”). Sur ce plan, il faut aussi mentionner que, dans [3], nous avons introduit l’extension quantique du concept général de séparation (aveugle ou non) de sources puis, dans [3] et notamment [4, 5, 15], nous avons proposé diverses méthodes de séparation de sources quantiques et TPQ. Mais ces méthodes-là sont fondées sur d’autres principes que celui introduit ici. Nous n’imposons pas de contrainte de parcimonie (au sens : peu de valeurs non nulles) à la matrice densité considérée. La méthode de TPQ proposée ici est décrite en section 2. Des résultats de tests sont fournis en section 3. Enfin, la section 4 contient nos conclusions.

2 Méthode proposée

2.1 Première partie de la méthode

Nous considérons le cas d’un système quantique isolé. Dans la base de l’espace des états considérée, son comportement sur un intervalle de temps donné est donc défini par une matrice unitaire U , ici inconnue, qui dépend de la dynamique du système. La première partie de la méthode que nous proposons pour estimer U utilise un état “d’entrée” (c.-à-d. initial) du système qui est un mélange statistique ayant pour matrice densité ρ_1 . Le mélange statistique “de sortie” (c.-à-d. final) du système a alors pour matrice densité [13, 12] :

$$\rho_2 = U \rho_1 U^\dagger \quad (1)$$

où \cdot^\dagger représente la transconjugaison.

En pratique, on réalise des mesures en sortie du processus étudié et on en déduit une estimée $\hat{\rho}_2$ de ρ_2 , par exemple en ayant recours à une des méthodes de Tomographie d'Etat Quantique (TEQ) de la littérature [13].

Partant de $\hat{\rho}_2$, nous estimons ici une partie de U comme suit. Tout d'abord, ρ_2 est hermitienne et à trace unitaire, car c'est une matrice densité (voir [12] p. 283, [13] p. 101, [14] p. 73). Donc, si son estimée $\hat{\rho}_2$ ne vérifie pas ces propriétés (suivant la méthode de TEQ "externe" utilisée), on la pré-traite afin d'obtenir une estimée $\hat{\rho}_4$ qui les vérifie. Pour cela, on réalise les opérations :

$$\hat{\rho}_3 = \frac{1}{2} (\hat{\rho}_2 + \hat{\rho}_2^\dagger) \quad (2)$$

$$\hat{\rho}_4 = \frac{\hat{\rho}_3}{\text{Trace}(\hat{\rho}_3)}. \quad (3)$$

Par ailleurs, on considère le cas où ρ_1 est diagonale dans la base considérée. La matrice ρ_2 étant hermitienne, elle est normale (voir [9] p. 100) et donc unitairement diagonalisable (voir [9] p. 157 (e), 101, 104). L'équation (1) correspond à une telle diagonalisation. La première partie de notre méthode de TPQ consiste donc à diagonaliser $\hat{\rho}_4$. Ce problème de diagonalisation a plusieurs solutions, à cause de ses indéterminations. Chacune de ces solutions est définie par deux matrices, notées D_4 et V_4 . D_4 est une matrice diagonale qui contient les valeurs propres de $\hat{\rho}_4$ dans un ordre arbitraire (voir [9] p. 102). De plus, chaque colonne de V_4 est un vecteur propre de $\hat{\rho}_4$ et V_4 est ici unitaire (car $\hat{\rho}_4$ est unitairement diagonalisable), donc $V_4^{-1} = V_4^\dagger$. Ces résultats V_4 et D_4 de la diagonalisation sont liés à la matrice initiale $\hat{\rho}_4$ par :

$$\hat{\rho}_4 = V_4 D_4 V_4^{-1} \quad (4)$$

$$= V_4 D_4 V_4^\dagger. \quad (5)$$

En comparant (5) à (1), où $\hat{\rho}_4$ est une estimée de ρ_2 et ρ_1 une matrice diagonale, on voit que (1) est une des diagonalisations possibles de $\hat{\rho}_4$, aux erreurs d'estimation près. Les matrices D_4 et V_4 obtenues en pratique avec nos algorithmes sont donc respectivement égales à ρ_1 et U aux indéterminations près du processus de diagonalisation (et aux erreurs d'estimation près). En particulier, V_4 est la première quantité obtenue liée à l'estimation de U (on pourrait donc la noter \hat{U}_1).

Nous réduisons ensuite les indéterminations précitées de la manière suivante. Nous imposons à toutes les valeurs sur la diagonale de ρ_1 d'être différentes. Ainsi, toutes les valeurs propres de ρ_2 et donc $\hat{\rho}_4$ (en ignorant les erreurs d'estimation) sont différentes. Chacune d'entre elles est donc associée à un sous-espace propre monodimensionnel différent, c.-à-d. tous les vecteurs propres associés à la même valeur propre sont colinéaires et les directions associées à deux valeurs propres différentes sont différentes (ceci est vrai pour toute matrice carrée complexe : voir [9] p. 47) et même orthogonales entre elles (voir [9] p. 103). Chaque valeur propre est donc couplée avec un unique vecteur propre dans chaque diagonalisation. La première indétermination de la diagonalisation de $\hat{\rho}_4$ est donc une possible permutation *couplée* des colonnes de la matrice V_4 et des valeurs le long de la diagonale de la matrice D_4 . Nous résolvons ce problème de permutation en imposant aux valeurs diagonales de ρ_1 d'être dans un ordre prédéfini (par exemple en ordre décroissant). On post-traite alors D_4

en permutant ses valeurs diagonales (ou les modules de ces valeurs, si elles ne sont pas réelles en pratique) pour qu'elles soient dans le même ordre que celles de ρ_1 . Nous utilisons la même permutation pour permuter les colonnes de V_4 . La matrice ainsi obtenue est notée \hat{U}_2 .

La seule indétermination subsistant à ce stade est un facteur d'échelle complexe, séparément pour chaque colonne de \hat{U}_2 , car chacune de ces colonnes appartient au sous-espace propre monodimensionnel adéquat. Comme U est unitaire, nous réduisons alors ce facteur d'échelle à un facteur de phase, en divisant chaque colonne de \hat{U}_2 par sa norme (si ce n'est pas déjà fait par l'algorithme de diagonalisation utilisé). Ainsi

$$\hat{U}_2 = [e^{i\phi_1} u_1, \dots, e^{i\phi_d} u_d] \quad (6)$$

où u_1, \dots, u_d sont les vecteurs colonnes de la vraie matrice U et ϕ_1, \dots, ϕ_d sont les indéterminations de phase par rapport à ces vecteurs qui subsistent à ce stade. En notant D_ϕ la matrice diagonale qui contient les facteurs de phase inconnus $e^{i\phi_1}, \dots, e^{i\phi_d}$ sur sa diagonale principale, (6) s'écrit

$$\hat{U}_2 = U D_\phi. \quad (7)$$

2.2 Deuxième partie de la méthode

La deuxième partie de notre algorithme a pour but de déterminer tous les facteurs de phase $e^{i\phi_1}, \dots, e^{i\phi_d}$, à un facteur de phase global près (de toute façon, quelle que soit la méthode de TPQ considérée, la matrice U du processus considéré ne peut être définie qu'à un facteur de phase global près, comme pour un ket). Pour cela, il suffit d'appliquer en entrée du processus un état unique, connu et pur, correspondant à un ket $|\Psi_1\rangle$. L'état pur correspondant en sortie du processus est défini par le ket

$$|\Psi_2\rangle = U|\Psi_1\rangle. \quad (8)$$

En pratique, on dispose d'un ket $|\hat{\Psi}_2\rangle$, obtenu en réalisant une TEQ à la sortie du processus et égal à $|\Psi_2\rangle$ à un facteur de phase inconnu et des erreurs d'estimation près. Si l'algorithme de TEQ considéré ne garantit pas que la norme de $|\hat{\Psi}_2\rangle$ est égale à 1, une étape de prétraitement recommandée consiste à diviser $|\hat{\Psi}_2\rangle$ par sa norme. Quand on néglige les erreurs d'estimation, on a :

$$|\hat{\Psi}_2\rangle = e^{i\theta} |\Psi_2\rangle \quad (9)$$

$$= e^{i\theta} U |\Psi_1\rangle. \quad (10)$$

Notre algorithme calcule le ket

$$|\Psi_3\rangle = \hat{U}_2^\dagger |\hat{\Psi}_2\rangle, \quad (11)$$

pour la raison suivante : en combinant (11), (7), (10) et comme U est unitaire (donc $U^\dagger U = I$) on obtient

$$|\Psi_3\rangle = e^{i\theta} D_\phi^* |\Psi_1\rangle \quad (12)$$

où $*$ représente la conjugaison. Cette équation est très utile car, en dehors de la phase globale θ , sa seule inconnue est D_ϕ , c.-à-d. l'ensemble des facteurs de phase $e^{i\phi_1}, \dots, e^{i\phi_d}$ à déterminer. Ce problème est facilement résolu en considérant chaque composante d'indice k , notée $|\cdot\rangle_k$, des kets présents dans (12). En utilisant un ket $|\Psi_1\rangle$ à composantes non nulles, (12) conduit à

$$\frac{|\Psi_3\rangle_k}{|\Psi_1\rangle_k} = e^{i(\theta - \phi_k)} \quad \forall k \in \{1, \dots, d\}. \quad (13)$$

L'équation (13) s'écrit sous forme matricielle :

$$\text{diag}(|\Psi_3\rangle \otimes |\Psi_1\rangle) = e^{i\theta} D_\phi^* \quad (14)$$

où \otimes représente la division composante par composante pour les vecteurs et $\text{diag}(v)$ est la matrice diagonale qui contient tous les éléments d'un vecteur v sur sa diagonale principale.

Compte tenu des propriétés présentées ci-dessus, l'étape finale de notre algorithme crée, comme suit, une nouvelle estimée de U notée \widehat{U}_3 :

$$\widehat{U}_3 = \widehat{U}_2 \text{diag}(|\Psi_3\rangle \otimes |\Psi_1\rangle). \quad (15)$$

Nous utilisons cette approche car, à cause de (14) et (7), l'équation (15) conduit à

$$\widehat{U}_3 = e^{i\theta} U \quad (16)$$

c.-à-d. \widehat{U}_3 réussit à restaurer U , à un facteur de phase près, qui n'a pas de conséquences physiques (et, à nouveau, à des erreurs d'estimation près, qui ont été mentionnées ci-dessus mais sont implicites dans les équations ci-dessus).

3 Résultats de tests

Pour valider la méthode de TPQ proposée et pour évaluer ses performances, nous avons réalisé des tests numériques avec des données créées à l'aide d'une simulations logicielle de la configuration considérée. Comme mentionné en section 2, cette méthode de TPQ réalise d'abord une TEQ pour chaque état de sortie de processus considéré. L'entrée de notre méthode de TPQ est donc constituée d'estimées d'un état pur et d'un mélange statistique fournies par une TEQ. Pour mesurer les performances de notre méthode de TPQ sans dépendre d'une méthode de TEQ particulière, nous utilisons ici un modèle numérique personnel des estimées d'états quantiques, dans lequel nous pouvons fixer la précision de ces estimées, et nous étudions la précision qui en résulte pour notre méthode de TPQ. Pour modéliser une estimée de ket (pour $|\Psi_2\rangle$), nous ajoutons des fluctuations aléatoires, indépendantes, à valeurs complexes, à la valeur théorique de chaque composante de ce ket. Leurs parties réelle et imaginaire sont créées séparément, avec un générateur aléatoire dont la densité de probabilité est uniforme sur l'intervalle $[-w/2, w/2]$, où le paramètre w définit l'amplitude des erreurs d'estimations modélisées. Pour les mélanges statistiques, nous avons développé un modèle cohérent avec celui ci-dessus, non détaillé ici. Nous faisons varier le paramètre w pour étudier la sensibilité de notre méthode de TPQ à l'amplitude des erreurs d'estimation de la TEQ.

Chaque test élémentaire utilise une matrice U de processus, de taille $d \times d$, obtenue comme facteur Q de la décomposition QR d'une matrice $d \times d$ réelle, aléatoire, dont les éléments ont une densité uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$. Le facteur Q ainsi obtenu, donc U , a la garantie d'être unitaire (voir [9] p. 112).

Chacune de ces matrices U est utilisée en l'appliquant aux états d'entrée de processus définis plus haut, en calculant les états de sortie exacts correspondants (en utilisant (1) et (8)), en en déduisant les estimées modélisées associées à la TEQ et en appliquant notre méthode de TPQ à ces estimées, afin d'en déduire l'estimée \widehat{U}_3 du processus quantique.

Le critère utilisé pour évaluer les performances dans un tel test a pour but de mesurer à quel point on s'approche du cas

où \widehat{U}_3 est égale à U à un facteur de phase près. Le critère utilisé pour cela est défini en introduisant tout d'abord

$$EQMN(U, \widehat{U}_3) = \min_{\theta} \left[\frac{1}{2d} \|U - e^{i\theta} \widehat{U}_3\|_F^2 \right] \quad (17)$$

où $\|\cdot\|_F$ représente la norme de Frobenius et où la phase θ est choisie pour minimiser cette EQMN. On peut montrer que la valeur d'EQMN résultant de cette minimisation est égale à :

$$EQMN(U, \widehat{U}_3) = \frac{1}{2d} \left[\|U\|_F^2 + \|\widehat{U}_3\|_F^2 - 2 |\text{Tr}(U^\dagger \widehat{U}_3)| \right]. \quad (18)$$

Le critère que nous utilisons finalement est :

$$REQMN(U, \widehat{U}_3) = \sqrt{EQMN(U, \widehat{U}_3)}. \quad (19)$$

Pour chaque dimension d de l'espace des états, les résultats fournis ont été obtenus en réalisant 100 tests élémentaires définis ci-dessus, chacun d'entre eux utilisant une matrice U de processus différente, tirée aléatoirement. Le résultat fourni est la moyenne de $REQMN(U, \widehat{U}_3)$ sur tous ces tests. Ce protocole est répété pour diverses valeurs de d .

Les tests présentés ont été réalisés sur un PC standard (Intel(R) Core(TM) i5-7500 CPU fonctionnant à 3.40 GHz avec 16 GB de RAM), en utilisant l'environnement logiciel Matlab. Nous fournissons en Fig. 1 les valeurs de REQMN obtenues pour toutes les valeurs de la dimension d de l'espace des états qui sont de la forme $d = 2^q$, où q est le nombre équivalent de qubits, qui varie ici de 2 à 13. $q = 13$ est la valeur maximale acceptée, dans l'environnement matériel et logiciel considéré, sans manquer de mémoire (pour un code non-optimisé). La Fig. 1 montre que, suivant la valeur de w , des valeurs modérées de REQMN peuvent être obtenues jusqu'à des valeurs élevées de la dimension d .

4 Conclusion

La Tomographie de Processus Quantique (TPQ) est un outil majeur, en particulier pour la caractérisation expérimentale des portes quantiques. Tirant parti du fait que leur comportement théorique est défini par une transformation unitaire (possiblement dense, c.-à-d. non parcimonieuse), nous avons ici développé un méthode de TPQ fondée en particulier sur la diagonalisation d'une matrice densité. Nous avons validé cette méthode à l'aide de simulations, y compris pour des nombres de qubits significatifs et donc des dimensions d'espace des états élevées. Nous étudions actuellement des méthodes plus générales fondées sur la diagonalisation, applicables à des dimensions encore plus élevées.

Références

- [1] C. H. BALDWIN, A. KALEV et I. DEUTSCH : Quantum process tomography of unitary and near-unitary maps. *Physical Review A*, 90:012110–1 to 012110–10, 2014.
- [2] A. BELOUHRANI, K. ABED-MERAIM, J.-F. CARDOSO et E. MOULINES : A blind source separation technique using second-order statistics. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 45(2):434–444, 1997.

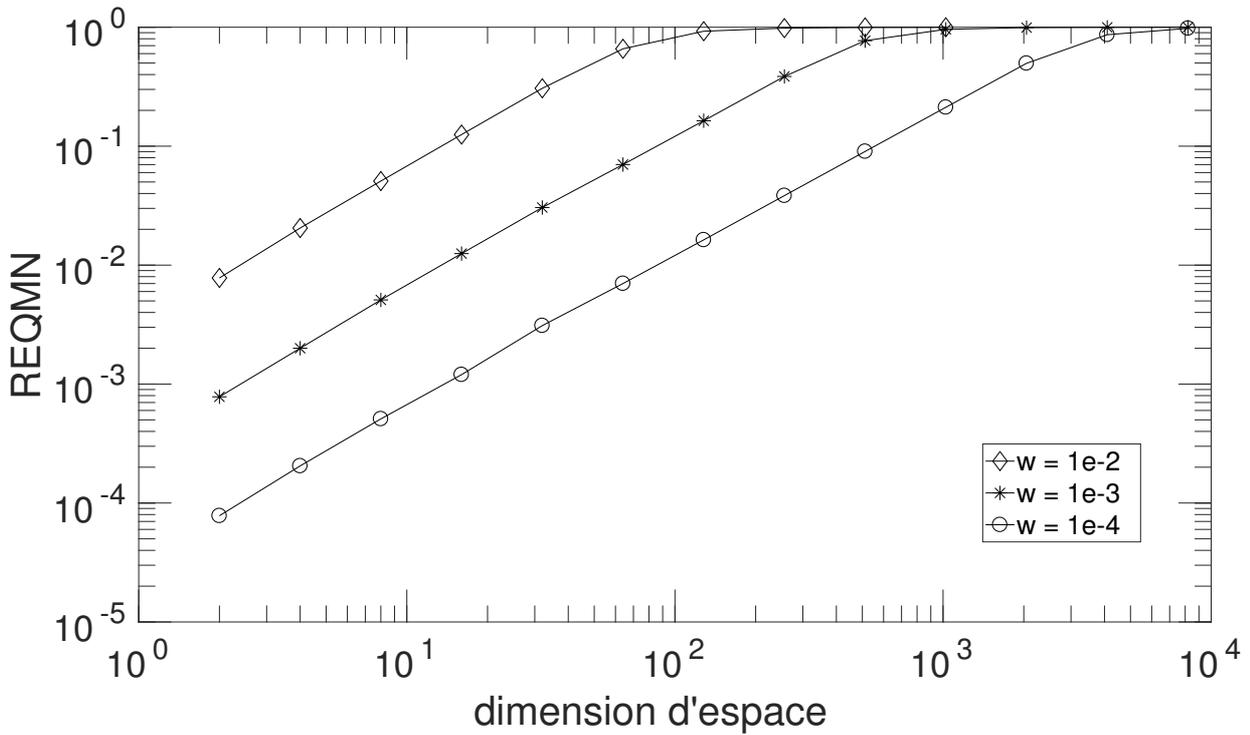


FIGURE 1 – Racine de l’Erreur Quadratique Moyenne Normalisée (REQMN), pour l’estimation de la matrice de processus U , avec la méthode de Tomographie de Processus Quantique (TPQ) proposée, en fonction de la dimension d de l’espace des états, pour plusieurs valeurs du paramètre w qui définit l’amplitude des erreurs d’estimation de la Tomographie d’Etat Quantique (TEQ).

- [3] Y. DEVILLE et A. DEVILLE : Blind separation of quantum states : estimating two qubits from an isotropic Heisenberg spin coupling model. *In Proceedings of the 7th International Conference on Independent Component Analysis and Signal Separation (ICA 2007)*, ISSN 0302-9743, Springer-Verlag, vol. LNCS 4666. Erratum : replace two terms $E\{r_i\}E\{q_i\}$ in (33) of [3] by $E\{r_i q_i\}$, since q_i depends on r_i ., pages 706–713, London, UK, Sept. 9-12 2007.
- [4] Y. DEVILLE et A. DEVILLE : Classical-processing and quantum-processing signal separation methods for qubit uncoupling. *Quantum Information Processing*, 11(6):1311–1347, 2012.
- [5] Y. DEVILLE et A. DEVILLE : New single-preparation methods for unsupervised quantum machine learning problems. *IEEE Transactions on Quantum Engineering*, 2(Article Sequence Number : 3104224, DOI : 10.1109/TQE.2021.3121797):1–24, 2021.
- [6] J. ESCANDÓN-MONARDES, D. UZCÁTEGUI, M. RIVERA-TAPIA, S.P. WALBORN et A. DELGADO : Estimation of high-dimensional unitary transformations saturating the Quantum Cramér-Rao bound. *Quantum*, 8:1405, 2024.
- [7] I. Lopez GUTIERREZ, F. DIETRICH et C.B. MENDEL : Quantum process tomography of unitary maps from time-delayed measurements. *Quantum Information Processing*, 22:paper no. 251, 2023.
- [8] G. GUTOSKI et N. JOHNSTON : Process tomography for unitary quantum channels. *Journal of Mathematical Physics*, 55(3):032201 (19 pages), 2014.
- [9] R. A. HORN et C. R. JOHNSON : *Matrix analysis*. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 1985.
- [10] S. KIMMEL et Y. K. LIU : Phase retrieval using unitary 2-designs. *In 2017 International Conference on Sampling Theory and Applications (SampTA)*, pages 345–349, Tallinn, Estonia, July (03-07) 2017.
- [11] L. LJUNG : *System identification : theory for the user*. Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, NJ, 1999.
- [12] A. MESSIAH : *Mécanique quantique - 1*. Dunod, Paris, 1962.
- [13] M. A. NIELSEN et I. L. CHUANG : *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- [14] A. PERES : *Quantum theory : concepts and methods*. Kluwer Academic, Dordrecht, The Netherlands, 1995.
- [15] F. VERDEIL et Y. DEVILLE : Unitary quantum process tomography with unreliable pure input states. *Physical Review A*, 108(6):062410 (20 pages), 2023.
- [16] S. XUE, Y. LIU, Y. WANG, P. ZHU, C. GUO et J. WU : Variational quantum process tomography of unitaries. *Physical Review A*, 105(3):032427 (8 pages), 2022.
- [17] H. ZHAO, L. LEWIS, I. KANNAN, Y. QUEK, H-Y HUANG et M.C. CARO : Learning quantum states and unitaries of bounded gate complexity. *PRX Quantum*, 5(4):040306, 2024.