

Marche quantique sur un réseau triangulaire sujet à des *Pachner moves* *

Rapport de stage de licence effectué sous la tutelle de Giuseppe Di Molfetta

Quentin Aristote

25 août 2019

Introduction

Un automate cellulaire est la donnée d'un étiquetage par un nombre fini d'états des sommets d'un graphe, qui évolue au cours du temps de manière locale, c'est-à-dire que l'état d'une cellule au temps $t + 1$ dépend seulement des états au temps t des cellules d'un voisinage fixé (autrement dit, l'information se déplace à vitesse bornée). Les automates cellulaires sont importants à la fois en informatique et en physique, puisqu'ils sont Turing-complets et qu'ils permettent de simuler l'évolution de systèmes physiques en les discrétisant.

Les automates cellulaires quantiques généralisent cette notion à l'informatique et à la physique quantique : les cellules sont désormais dans une superposition d'états, mais l'évolution est toujours locale. De même, les automates cellulaires quantiques permettent d'exécuter n'importe quel algorithme quantique et permettent de simuler l'évolution de systèmes physiques quantiques.

Les marches quantiques sont des automates cellulaires quantiques particuliers : elles décrivent la propagation réversible (à partir d'une configuration donnée on peut retrouver la configuration précédente) d'une particule quantique sur une grille. En plus d'être réalisables en pratique (à la différence d'un ordinateur quantique universel), elles permettent de visualiser intuitivement le fonctionnement d'un algorithme quantique : la particule se déplace sur une grille qui encode le problème et converge vers la cellule qui correspond à la solution. Elles permettent aussi de simuler des équations différentielles omniprésentes en physique, toujours de manière intuitive.

L'équipe CaNa (*Calcul Naturel*) du Laboratoire d'Informatique et Systèmes travaille entre autres sur ces objets, à la frontière entre informatique et physique. Elle a contribué au développement d'un marcheur quantique sur le réseau triangulaire (les arêtes du pavage du plan par des triangles équilatéraux) qui permet de simuler l'équation de Dirac en $(2 + 1)$ dimensions. L'objectif du stage était d'étendre ce marcheur à un réseau non plus fixé mais dynamique, ce qui n'avait jusqu'ici été fait que pour des automates cellulaires classiques. Plus précisément, le but était de prendre en compte les *Pachner moves*, des transformations de triangulations qui ne changent pas la topologie de la surface triangulée.

*Ce rapport est très similaire à l'article éponyme écrit dans le cadre du stage [1]. Tandis que l'article, rédigé en anglais, se concentre sur les résultats obtenus lors du stage et leur mise en perspective dans le contexte actuel de la recherche, le rapport, rédigé en français, détaille aussi les impasses rencontrées et présente les résultats avec un vocabulaire un peu plus abordable.

Table des matières

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Deux théories élégantes : marche quantique sur le réseau triangulaire & <i>Pachner moves</i> | 2 |
| 1.1 | Marche quantique sur le réseau triangulaire | 2 |
| 1.2 | <i>Pachner moves</i> | 3 |
| 2 | Couplage entre le marcheur et la dynamique du réseau | 4 |
| 2.1 | Dynamique du réseau | 4 |
| 2.2 | Le marcheur quantique | 5 |
| 2.2.1 | Évolution du marcheur lors des 1-to-3 et des 2-to-2 <i>Pachner moves</i> | 5 |
| 2.2.2 | Évolution du marcheur lors des 3-to-1 <i>Pachner moves</i> | 6 |
| 2.3 | Conditions provoquant les <i>Pachner moves</i> | 8 |
| 3 | Premières simulations numériques | 8 |
| 3.1 | Implémentation | 8 |
| 3.2 | Résultats | 9 |
| 4 | Étude formelle du couplage | 9 |
| 5 | Nouvelles simulations | 11 |
| 5.1 | Mesures | 11 |
| 5.2 | Résultats | 11 |
| 6 | Conclusion et perspectives | 13 |

1 Deux théories élégantes : marche quantique sur le réseau triangulaire & *Pachner moves*

La première partie du stage consistait en un travail bibliographique ayant pour but de s'appropriier les deux théories à coupler.

1.1 Marche quantique sur le réseau triangulaire

Dans cette marche quantique, la particule est portée par les arêtes du réseau triangulaire plat, c'est-à-dire les côtés des triangles équilatéraux d'un pavage du plan. L'espace d'états est ainsi l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_e \otimes \mathcal{H}_s$ où \mathcal{H}_e est l'espace engendré par les états purs $|e\rangle$ pour e une arête du réseau et \mathcal{H}_s , l'espace des spins, est engendré par les états purs $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$.

Si v est un triangle et $k \in \{1, 2, 3\} \cong \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$, on écrit ainsi

$$\psi(t, v, k) = \begin{pmatrix} \psi^\uparrow(t, v, k) \\ \psi^\downarrow(t, v, k) \end{pmatrix}$$

le vecteur de \mathbb{C}^2 dont le carré de la norme est la probabilité qu'à l'instant t , la particule se situe sur le k -ième côté de v .

Soit $\tilde{\psi}(t, v, k) = U_k \psi(t, v, k)$, où U_1, U_2 et U_3 sont des matrices unitaires. On considère que chaque triangle du réseau est étiqueté par un spin (\uparrow ou \downarrow), de telle sorte que deux triangles adjacents ont des étiquetages différents. Un pas se déroule alors en deux étapes :

- on fait d'abord une rotation des composantes internes à chaque triangle : si le triangle v est étiqueté par le spin s , on pose pour chaque $k \in \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$

$$\tilde{\psi}^s \left(t + \frac{\epsilon}{2}, v, k \right) = \tilde{\psi}^s(t, v, k - 1)$$

— on applique ensuite une transformation unitaire à chaque arête du réseau :

$$\tilde{\psi}(t + \epsilon, v, k) = W \tilde{\psi} \left(t + \frac{\epsilon}{2}, v, k \right)$$

Puisque deux triangles adjacents ont des étiquetages différents, cela donne finalement

$$\tilde{\psi}(t + \epsilon, v, k) = W \begin{pmatrix} \tilde{\psi}^\uparrow(t, v, k - 1) \\ \tilde{\psi}^\downarrow(t, v, k - 1) \end{pmatrix}$$

Lorsque W et les U_k sont bien choisis, l'équation obtenue en itérant trois pas de la marche quantique admet lorsque ϵ tends vers 0 (ϵ est aussi, à un facteur près, le pas du réseau) une limite continue, l'équation de Dirac en $(2+1)$ dimensions, qui décrit la propagation de particules de matières, tels que les électrons, sur une surface euclidienne [2]. Cette marche quantique se généralise aussi facilement pour obtenir une équation de Dirac courbée, qui décrit la propagation de particules de matières sur une surface dont la métrique est courbée, par exemple par la présence d'un champ gravitationnel [3].

1.2 Pachner moves

Un n -to- m Pachner move est une transformation d'une triangulation (*id est* d'une surface discrète [4]) qui consiste à remplacer un sous-ensemble de n triangles de la triangulation initiale par son complémentaire dans $\partial\Delta_{n+m-1}$, la triangulation de la sphère de dimension $n + m - 2$ (par exemple, $\partial\Delta_3$ est un tétraèdre). Ces transformations sont plus simples à visualiser sur le graphe associé à la triangulation (les sommets représentent les triangles et sont reliés par les arêtes qui représentent les côtés qu'ils partagent, comme représenté en figure 1). Par exemple, un 1-to-3 Pachner move est représenté en figure 2b.

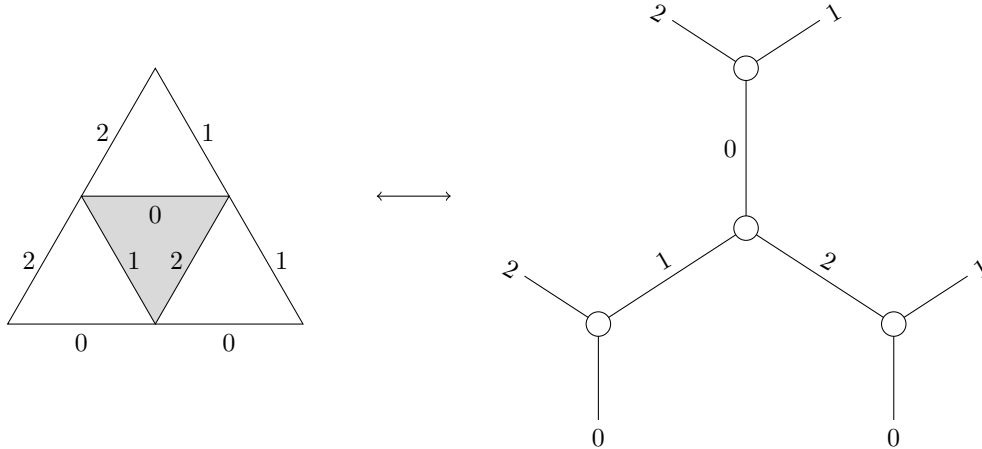


FIGURE 1 – Représentation d'une triangulation par un graphe.

Deux triangulations homéomorphes sont toujours reliées par une suite finie de *Pachner moves*. Réciproquement, les *Pachner moves* ne changent pas la topologie d'une triangulation. Ainsi permettre au réseau de se transformer *via* des *Pachner moves* revient à lui permettre de se transformer en n'importe quelle triangulation topologiquement équivalente.

On notera finalement que, puisque $\partial\Delta_3$ est un tétraèdre, on peut considérer qu'appliquer un 1-to-3 *Pachner move* sur le réseau triangulaire plat revient à créer un puit, et que réciproquement un 3-to-1 *Pachner move* (la transformation inverse) peut être considéré comme la suppression d'un tel puit.

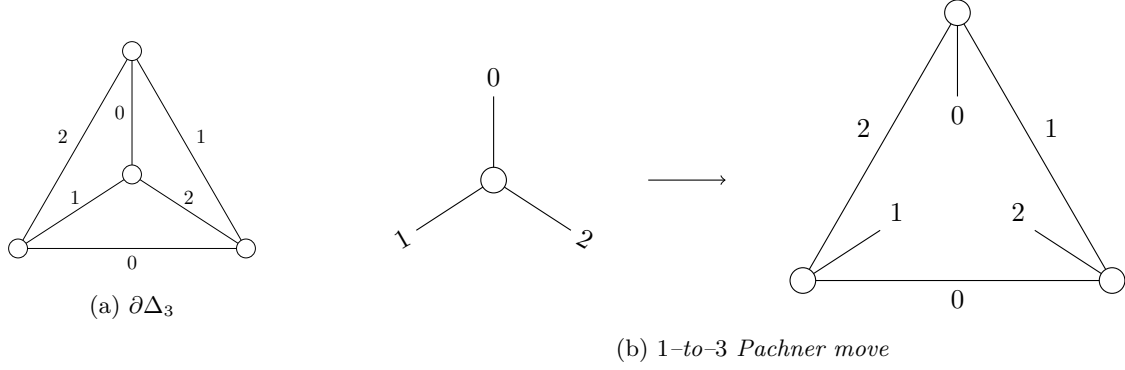


FIGURE 2 – Un exemple de *Pachner move*

2 Couplage entre le marcheur et la dynamique du réseau

L'objectif était donc de réussir à étendre la marche quantique sur le réseau triangulaire plat pour prendre en compte les *Pachner moves*.

2.1 Dynamique du réseau

On définit d'abord la façon dont l'étiquetage des triangles par les spins évolue sous l'action des *Pachner moves*.

Un premier constat est qu'un tel étiquetage n'est en fait pas suffisant. En effet, les *1-to-3 Pachner moves* créent des 3-cycles dans le graphe associé au réseau. Il n'est donc pas possible d'étiqueter le graphe avec des spins de telle sorte que deux triangles adjacents portent deux spins différents : cela reviendrait à trouver un 2-coloriage du graphe associé ce qui est impossible dès qu'il contient des 3-cycles. On étend donc l'ensemble des étiquettes à

$$\Sigma = \{(\uparrow, \uparrow, \uparrow), (\downarrow, \downarrow, \downarrow), (\uparrow, \uparrow, \downarrow), (\downarrow, \downarrow, \uparrow)\}$$

et on identifie \uparrow à $(\uparrow, \uparrow, \uparrow)$ et \downarrow à $(\downarrow, \downarrow, \downarrow)$. Cela permet notamment d'avoir un étiquetage du réseau triangulaire plat avec des étiquettes de Σ équivalent à l'étiquetage décrit en section 1.

On interprète alors le fait qu'un triangle v soit étiqueté par (s_1, s_2, s_3) en disant que v porte la composante en s_1 de son premier côté, la composante en s_2 de son deuxième côté et la composante en s_3 de son troisième côté. Autrement dit, ce sont ces trois composantes du champ $\tilde{\psi}$ qui interviennent lors de la rotation interne au triangle v .

En réalité, l'idée initiale était de prendre les étiquettes dans $\{\uparrow, \downarrow\}^3$, et elle semble plus appropriée puisque le choix des éléments de Σ peut sembler arbitraire. Le choix d'utiliser Σ est en fait justifié par le fait qu'il permette d'étendre intuitivement les *Pachner moves*.

En effet, on peut étiqueter $\partial\Delta_3$ avec des étiquettes de Σ de manière à ce que deux triangles adjacents portent chacun une composante différente du côté qu'ils partagent, comme en figure 3.

L'extension des *Pachner moves* aux triangulations étiquetées de la sorte est alors immédiate : si un ensemble de triangles est isomorphe (avec étiquetages) à un sous-graphe de $\partial\Delta_3$, on peut le remplacer par le complémentaire de ce sous-graphe. Pour s'assurer que deux triangles adjacents portent toujours chacun une composante différente du côté qu'ils partagent, on inverse finalement les étiquetages des triangles nouvellement introduits (\uparrow devient \downarrow et inversement). Un *1-to-3 Pachner move* est par exemple représenté en figure 4. On notera qu'avec cette définition, on a toujours qu'un *n-to-m Pachner move* est l'inverse d'un *m-to-n Pachner move*.

Lemme 2.1. *Après une suite quelconque de Pachner moves, deux triangles adjacents ont toujours des étiquettes disjointes.*

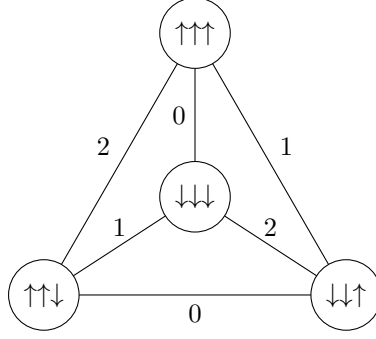


FIGURE 3 – Un étiquetage possible de $\partial\Delta_3$.

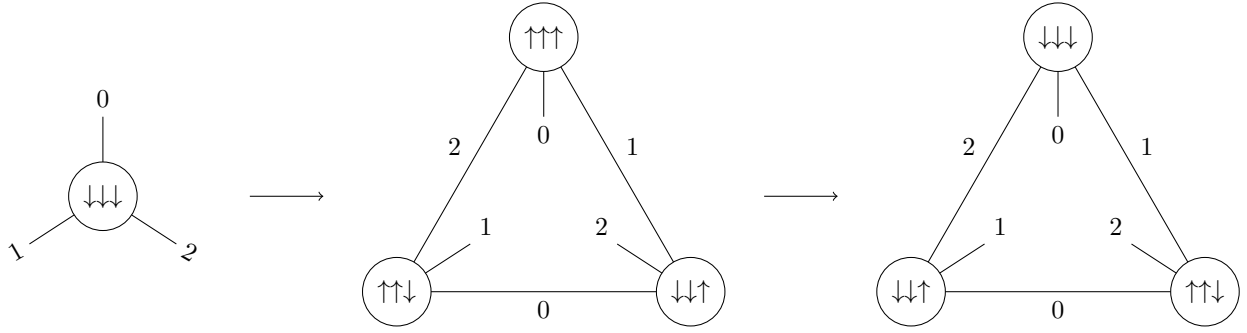


FIGURE 4 – 1-to-3 Pachner move

Démonstration. Soit u et v deux tels triangles d'étiquetages respectifs (r_1, r_2, r_3) et (s_1, s_2, s_3) , ils partagent leur i -ème côté. On s'est donc assurés que $r_i \neq s_i$ (ils portent chacun une composante différente du côté qu'ils partagent). On a donc que $(r_1, r_2, r_3) \neq (s_1, s_2, s_3)$. \square

Ce lemme implique que pour une clique de $n \leq 3$ triangles du réseau triangulaire, le n -to- $(4-n)$ Pachner move associé est toujours bien défini.

2.2 Le marcheur quantique

À chaque instant t , on impose alors au champ $\tilde{\psi}$ d'évoluer de la façon suivante :

- on effectue d'abord une rotation interne à chaque triangle : si le triangle v a pour étiquette (s_1, s_2, s_3) , on pose pour $k \in \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$

$$\tilde{\psi}^{s_k}(t + \Delta t, v, k) = \tilde{\psi}^{s_{k-1}}(t, v, k - 1)$$

- on applique ensuite la transformation W à chaque arête :

$$\tilde{\psi}(t + \Delta t, v, k) = W\tilde{\psi}(t, v, k)$$

- on effectue enfin les Pachner moves pour cet instant, comme décrit ci-dessous.

2.2.1 Évolution du marcheur lors des 1-to-3 et des 2-to-2 Pachner moves

Avec le point de vue des triangulations (et non des graphes), un 1-to-3 Pachner move peut être vu comme la création de trois nouvelles arêtes à l'intérieur d'un triangle. Il paraît donc naturel de ne pas changer la valeur de $\tilde{\psi}$ sur les anciennes arêtes et de le définir égal à 0 sur ces nouvelles arêtes (afin de toujours avoir $\|\psi\|^2 = 1$), comme représenté sur la figure 5.

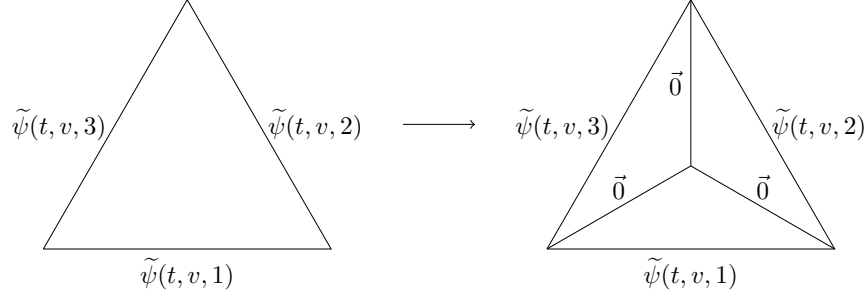


FIGURE 5 – Évolution du marcheur lors d'un 1-to-3 *Pachner move*

De même, un 2-to-2 *Pachner move* peut être vu comme une rotation et une déformation de l'arête qui sépare les deux triangles impliqués. Il semble donc naturel de ne pas changer les valeurs de $\tilde{\psi}$ sur les arêtes, comme représenté sur la figure 6.

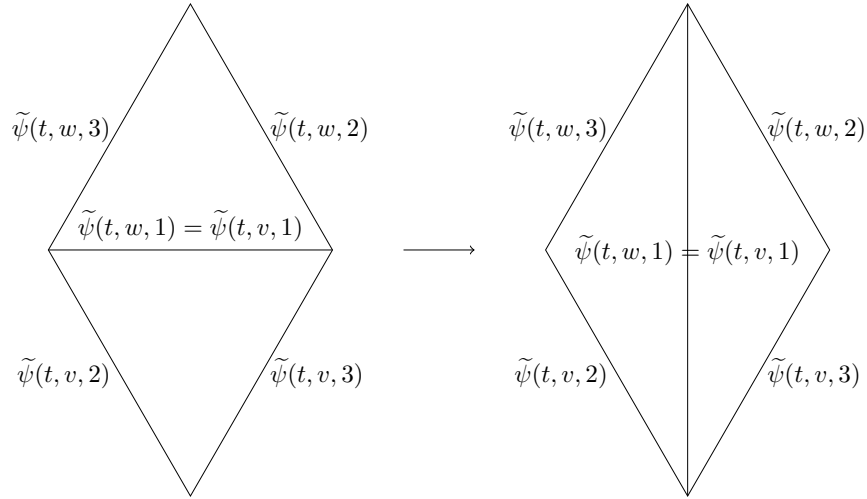


FIGURE 6 – Évolution du marcheur lors d'un 2-to-2 *Pachner move*

2.2.2 Évolution du marcheur lors des 3-to-1 *Pachner moves*

Les 3-to-1 *Pachner moves* sont plus compliqués à étendre, car ils suppriment des arêtes. En effet, si les deux extensions précédentes conservent la réversibilité des transformations, il faut nécessairement considérer un nombre infini d'arêtes pour que ce soit aussi vrai pour les 3-to-1 *Pachner moves* : si après une telle transformation $\tilde{\psi}$ est modifié sur un nombre fini n d'arêtes, alors la transformation ne peut être injective (on envoie un espace de dimension $2n + 6$ dans un espace de dimension $2n$).

Mais prendre en compte un nombre infini d'arêtes entraîne un problème de localité : un *Pachner move* sur un triangle peut modifier la valeur de $\tilde{\psi}$ sur un triangle infiniment loin. Pour corriger partiellement ce problème, on considère que $\tilde{\psi}$ est à support fini, c'est-à-dire qu'il est non nul sur un nombre fini d'arêtes. Ainsi, il est possible de trouver une transformation unitaire qui agit sur un nombre infini d'arêtes tout en ne modifiant la valeur de $\tilde{\psi}$ que sur un nombre fini d'entre elles en pratique, en choisissant la transformation locale.

Une telle transformation est par exemple une simple translation, comme celle représentée en figure 7 : si trois triangles forment un 3-cycle sur lequel on applique un 3-to-1 *Pachner move*, alors toute composante interne au 3-cycle, portée par un de ces triangles v sur son k -ième côté, est translatée selon le côté de v

qui sort du 3-cycle sur le triangle voisin w , puis est de nouveau translatée selon le k -ième côté de w pour remplacer la composante portée par le voisin de w sur son k -ième côté. La composante remplacée est alors elle aussi translatée selon les mêmes côtés et remplace une autre composante elle même translatée, ainsi de suite. Formellement, si $e(v, k)$ est le triangle voisin de v sur son k -ième côté, on écrit $\tilde{\psi}(t + \Delta t, e(e(v, l), k), k) = \tilde{\psi}(t, v, k)$, $\tilde{\psi}(t + \Delta t, e(e(e(v, l), k), l), k) = \tilde{\psi}(t, e(e(v, l), k), k)$, et *cetera*, si le l -ième côté de v sort du 3-cycle.

Une fois la translation terminée, les arêtes internes au 3-cycle peuvent finalement être supprimées puisque l'information qu'elles portaient a été envoyée à l'extérieur du 3-cycle.

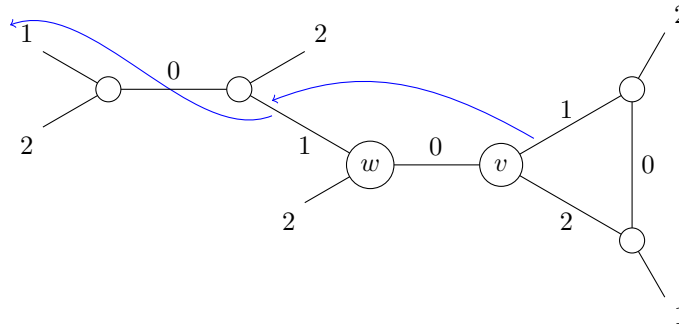


FIGURE 7 – Translation de la composante interne à v sur son premier côté lors d'un 3-to-1 Pachner move

On notera qu'il est physiquement cohérent que les triangles influent ceux à deux arêtes de distance (et non une seule) car la distance géométrique entre les triangles est tout de même de 1 (les triangles partagent un sommet).

Lemme 2.2. *Après un nombre fini de 1-to-3 et 3-to-1 Pachner moves, toute translation selon deux arêtes comme décrite précédemment ne passe qu'au plus une fois par un triangle du réseau.*

Démonstration. C'est vrai pour le réseau triangulaire plat : effectuer une translation selon deux arêtes revient à effectuer une translation selon un vecteur fixé dans le plan. Ainsi tout triangle ne peut être visité qu'au plus une fois.

Soit désormais un réseau triangulaire pour lequel cette propriété est vraie. Alors elle est toujours vraie après avoir appliqué un 1-to-3 ou un 3-to-1 Pachner move. En effet, comme on peut le voir sur la figure 8, appliquer une telle transformation conserve les cycles parmi les chemins suivis par une translation selon deux arêtes. Si on trouvait ainsi un cycle dans le réseau après l'application du Pachner move, alors il serait aussi présent dans le réseau initial puisqu'on peut obtenir celui-ci en appliquant le Pachner move inverse. Ainsi il ne peut y avoir de cycle dans le nouveau réseau, donc la propriété est vérifiée.

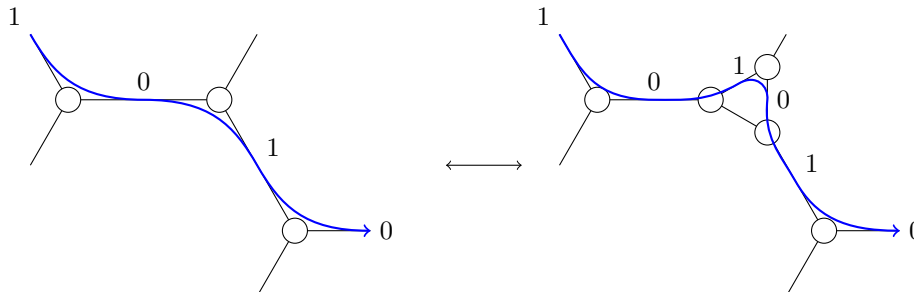


FIGURE 8 – Les 1-to-3 et 3-to-1 Pachner moves conservent les cycles de la forme $(ab)^k$.

On obtient finalement le résultat énoncé par récurrence. □

Cela signifie notamment que lorsqu'on se restreint aux 1-to-3 et 3-to-1 *Pachner moves*, la translation ne modifie $\tilde{\psi}$ que sur un nombre fini d'arêtes (elle visite au plus une fois chaque triangle et il y a un nombre fini de triangles sur lesquels $\tilde{\psi}$ est non nul) et qu'elle est réversible : il n'y a pas de cycle donc rien n'est translaté sur les arêtes à supprimer.

Malheureusement, ce résultat n'est pas vrai lorsqu'on autorise les 2-to-2 *Pachner moves*, puisque ceux-ci peuvent créer des cycles parmi les chemins qui suivent deux arêtes périodiquement. Nous n'avons pas réussi à trouver une translation bien définie lorsque les 2-to-2 *Pachner moves* sont pris en compte, cependant nous pensons qu'il est quand même possible de les considérer, soit en trouvant une transformation unitaire qui fonctionne, soit en n'autorisant les 2-to-2 *Pachner moves* que lorsque certaines conditions sont réunies, afin d'empêcher la formation de cycles.

Nous avons donc décidé de nous restreindre aux 1-to-3 et aux 3-to-1 *Pachner moves* puisque les 2-to-2 *Pachner moves* posent aussi problème pour visualiser le réseau triangulaire en trois dimensions.

2.3 Conditions provoquant les *Pachner moves*

En pratique, effectuer un 1-to-3 ou un 3-to-1 *Pachner move* courbe la métrique, puisque la particule qui se propage doit traverser plus de triangles après un 1-to-3 *Pachner move* qu'avant pour parcourir une distance fixée. Or, dans la théorie de la relativité générale, c'est la matière elle-même qui courbe ainsi la métrique. En adoptant ce point de vue ici, il est donc naturel de choisir d'effectuer un 1-to-3 *Pachner move* (créer un puit) sur un triangle v dès lors que la probabilité que la particule s'y situe est supérieure à un seuil α (si v a pour étiquette (s_1, s_2, s_3) , dès lors que $\sum_{k=1}^3 |\psi^{s_k}(t, v, k)|^2 > \alpha$); et d'effectuer un 3-to-1 *Pachner move* (supprimer un puit) sur un 3-cycle dès lors que la probabilité de se trouver dans le puit correspondant est inférieure à un seuil β (si u et v partagent leur premier côté, v et w leur deuxième côté et w et v leur troisième côté, on effectue un 3-to-1 *Pachner move* dès lors que $\|\psi(t, u, 1)\|^2 + \|\psi(t, v, 2)\|^2 + \|\psi(t, w, 3)\|^2 < \beta$).

3 Premières simulations numériques

Afin d'étudier ce couplage, nous avons tout d'abord effectué quelques simulations dans le but d'observer des motifs récurrents dans le comportement du marcheur ou du réseau et d'en tirer des conjectures.

3.1 Implémentation

Afin d'effectuer ces simulations, une librairie a été développée en Python [5]. Elle ne prends en compte que les triangles pour lesquels la probabilité de présence est non nulle et mets à jour cet ensemble à chaque pas. Par rapport à l'implémentation plus conventionnelle qui consiste à considérer un ensemble de $N \times N$ triangles, cette implémentation a l'avantage d'améliorer le temps et l'espace de calcul et de donner la possibilité à l'utilisateur de pousser les calculs aussi longtemps qu'il le souhaite (et que la puissance de sa machine le lui permette).

Pour une telle implémentation, l'approche récursive du codage du réseau (pour laquelle un triangle est la donnée de ses trois voisins ainsi que des valeurs de ψ qu'il porte) n'est pas suffisante : on pourrait imaginer créer deux triangles voisins indépendamment et ainsi ne jamais savoir qu'ils sont voisins. À la place, on identifie un triangle par les coordonnées de ses trois sommets (de même pour une arête), et on lui donne comme attributs les coordonnées correspondant aux triangles voisins, tout en ayant en parallèle un dictionnaire reliant coordonnées et triangles.

Cette approche non récursive a aussi le mérite de permettre de sauvegarder les résultats dans la ROM plus facilement (avec l'approche récursive il faudrait recalculer les valeurs des pointeurs vers les voisins). En termes de complexité pure cette sauvegarde du réseau n'est intéressante que lorsque l'on ne souhaite accéder à la structure du réseau qu'à partir d'un certain instant $t \gg 1$. En effet, la lecture de l'état du réseau comme le calcul du réseau à l'instant suivant se font tous deux en temps linéaire en le nombre de triangles et en espace constant. Le nombre de triangles à l'instant t est lui un $\Theta(t^2)$.

3.2 Résultats

Nous avons considéré les couples $\{(\alpha, \beta) = (e^{-i/2}, e^{-j/2}) \mid i, j \in \llbracket 0, 15 \rrbracket^2\}$ et posé à $t = 0$ la condition initiale $\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}$ sur les composantes d'un triangle et $\psi = 0$ ailleurs. Pour $t \gg 1$, le réseau semble redevenir plat (on ne voit plus apparaître de 3-cycles et le marcheur retrouve ainsi le comportement qu'il a quand on omet les *Pachner moves*).

D'où notre conjecture : la dynamique du couplage est constituée de deux phases. Dans la première, le réseau subit des *Pachner moves* jusqu'à ce que la particule se soit suffisamment diffusée pour qu'il n'y en ait plus jamais. Le réseau reste plat et la particule se propage comme dans la marche quantique sur le réseau plat (son comportement obéit alors à l'équation de Dirac) : c'est la seconde phase.

4 Étude formelle du couplage

Nous avons donc tenté d'étudier le couplage formellement afin de montrer cette conjecture.

Pour ce faire, il a d'abord fallu changer la façon dont on écrivait ψ : l'exprimer comme une fonction des triangles est en effet peu pratique dès lors qu'on essaie d'écrire les équations pour les *Pachner moves*. On désigne donc d'abord un triangle du réseau triangulaire plat comme étant l'origine. On peut le suivre lorsqu'il est sujet à un *Pachner move* puisqu'un 1-to-3 *Pachner move* crée toujours un triangle avec la même étiquette que celui auquel on l'a appliqué (ce ne serait pas vrai si on autorisait aussi les 2-to-2 *Pachner moves*) : ce nouveau triangle devient l'origine. Le graphe associé au réseau peut donc être vu comme un graphe pointé, et ainsi un triangle du réseau peut être vu comme le langage des mots qui correspondent à un chemin de l'origine jusqu'à ce triangle [6]¹. Par exemple, si un langage v correspond à un triangle, alors le voisin de ce triangle sur son premier côté correspond au langage $v.1 = \{x.1 \mid x \in v\}$, et on identifie n'importe quel $x \in v$ à v lui-même. Alors

— si v a pour étiquette (s_1, s_2, s_3) , on écrit pour tout $k \in \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$

$$\psi(t, v : k) = \psi^{s_k}(t, v, k)$$

$$\psi(t, v : k : v.k) = \psi(t, v, k)$$

— si le triangle v porte la composante en \uparrow de son k -ième côté et son voisin $v.k$ porte la composante en \downarrow , on écrit

$$\psi \left(t, \frac{v}{k} \right) = \begin{pmatrix} \psi(t, v : k) \\ \psi(t, v.k : k) \end{pmatrix}$$

On peut ainsi écrire après les rotations internes aux triangles et l'application de W

$$\tilde{\psi} \left(t + \epsilon, \frac{v}{w} \right) = W \begin{pmatrix} \tilde{\psi}(t, v : k - 1) \\ \tilde{\psi}(t, w : k - 1) \end{pmatrix} = (WR\tilde{\psi}(t)) \begin{pmatrix} v \\ k \\ w \end{pmatrix}$$

(on voit alternativement W comme un opérateur de dimension 2 lorsqu'il agit sur une arête et comme un opérateur de dimension infinie lorsqu'il agit sur toutes les arêtes).

Après l'application des 1-to-3 *Pachner moves*,

$$\tilde{\psi} \left(t + 3\epsilon, \frac{\prod_{i=1}^n k_i (k_{i+1} k_i)^{\mathbb{1}_{1 \rightarrow t+2\epsilon 3}(\prod_{j=1}^i k_j)}}{k} \right) = (1 - \mathbb{1}_{1 \rightarrow t+2\epsilon 3}(\prod_{i=1}^n k_i) (1 - \delta_{k_n=k})) \tilde{\psi} \left(t + 2\epsilon, \frac{\prod_{i=1}^n k_i}{(\prod_{i=1}^n k_i) k} \right)$$

1. Le lecteur intéressé pourra aussi se référer à mon mémoire de licence de mathématiques qui reprends la preuve du bien-fondé de cette définition [7]

Cette équation décrit à la fois la façon dont les triangles sont renommés (on ajoute des lettres dans le milieu du mot pour chaque *Pachner move* effectué sur le chemin correspondant) et ce que devient $\tilde{\psi}$ (il s'annule si et seulement l'arête fait partie d'un triangle qui subit un *Pachner move* et si la nouvelle arête de même nom fait partie du nouveau 3-cycle, sinon il ne change pas). La fonction $\mathbb{1}_{1 \rightarrow t, 3}$ indique si un 1-to-3 *Pachner move* doit être réalisé sur le triangle à l'instant t :

$$\mathbb{1}_{1 \rightarrow t, 3} = \begin{cases} 1 & \text{si } \sum_{k=1}^3 |\psi(t, v : k)|^2 > \alpha \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Finalement, soit $3\text{-cycles}(t)$ l'ensemble

$$\left\{ c = \{u : 0, v : 1, w : 2, u : 1 : w, u : 2 : v, v : 0 : w\} \mid \sum_{\substack{s \in \{u, v, w\} \\ k \in \pi \\ s : k \notin c}} |\psi(t + \epsilon, s : k)|^2 < \beta \right\}$$

Alors, après les 3-to-1 *Pachner moves*,

$$\tilde{\psi}(t + 2\epsilon) = \left(\prod_{c \in 3\text{-cycles}(t+\epsilon)} D_c \circ T_c \right) \tilde{\psi}(t + \epsilon)$$

avec

$$\begin{aligned} (T_c \tilde{\psi})(u : k) &= \delta_{\exists n \in \mathbb{N}^*, u.(k(k+1))^n : k+1 \in c} \tilde{\psi}(u.k(k+1) : k) \\ &+ \delta_{\exists n \in \mathbb{N}^*, u.(k(k+2))^n : k+2 \in c} \tilde{\psi}(u.k(k+2) : k) \\ &+ \delta_{\forall n \in \mathbb{N}, l \in \{k+1, k+2\}, u.(kl)^n : l \notin c} \tilde{\psi}(u : k) \end{aligned}$$

et

$$(D_c \tilde{\psi})(u = \prod_{i=1}^n k_i : k) = \tilde{\psi}(\prod_{i \in I_c^u} k_i)$$

où

$$I_c^u = \{i \in \llbracket 1, n \rrbracket \mid \prod_{j=1}^i k_j : k_{i+1} : (\prod_{j=1}^i k_j) k_{i+1} \notin c\}$$

T_c est la transformation unitaire qui translate les valeurs de $\tilde{\psi}$ et D_c et celle qui renomme les triangles après la suppression des arêtes. Notons que l'ordre dans lesquels les 3-cycles doivent être considérés n'est pas précisé : nous avons choisi de le faire par ordre décroissant de probabilité, mais ce choix ne semble pas influencer le comportement global de la marche.

En mettant ces trois équations bout-à-bout, on obtient l'équation discrète régissant à la fois la marche et la dynamique du réseau :

$$\tilde{\psi} \left(t + 3\epsilon, \frac{\prod_{i=1}^n k_i (k_{i+1} k_i)^{\mathbb{1}_{1 \rightarrow t, 3}(\prod_{j=1}^i k_j)}}{k} \right) = (1 - \mathbb{1}_{1 \rightarrow t, 3}(\prod_{i=1}^n k_i) (1 - \delta_{k_n = k})) \times \left(\left(\prod_{c \in 3\text{-cycles}} D_c \circ T_c \right) W R \tilde{\psi}(t) \right) \left(\frac{\prod_{i=1}^n k_i}{(\prod_{i=1}^n k_i) k} \right)$$

Malheureusement, cette équation est hautement non linéaire et donc complexe à étudier. Elle permet cependant de retrouver certains comportements limites comme lorsque $\alpha = 1$ ou $\beta = 0$.

Pour trouver la limite continue d'un marcheur, il faut exprimer cette équation comme une fonction des coordonnées des arêtes dans le plan. Si c'est possible dans certains cas (par exemple si on ne considère pas les *Pachner moves* et que le triangle visé est équilatéral), ceux-ci sont trop restreints pour obtenir des résultats.

Dans le cas général, une possibilité serait d'exprimer la distance entre deux arêtes à partir de la courbure du réseau (comme définie en [8] par exemple) qui devrait vraisemblablement avoir pour limite continue la courbure de la surface. Cependant nous ne sommes pas parvenus à développer cette idée.

Un autre objet à étudier serait l'entropie de Shannon de la distribution du marcheur. En effet, elle permet de faire fi des *Pachner moves* et des rotations (qui ne font que permuter les valeurs de $\tilde{\psi}$ sur les arêtes), et pourrait donner lieu à des résultats sur la localisation (ou la dispersion) de la particule. Cependant, là encore, nous ne sommes pas parvenus à développer cette idée.

5 Nouvelles simulations

L'approche formelle ne menant pas à des résultats significatifs, nous avons donc tenté de montrer des résultats numériquement.

5.1 Mesures

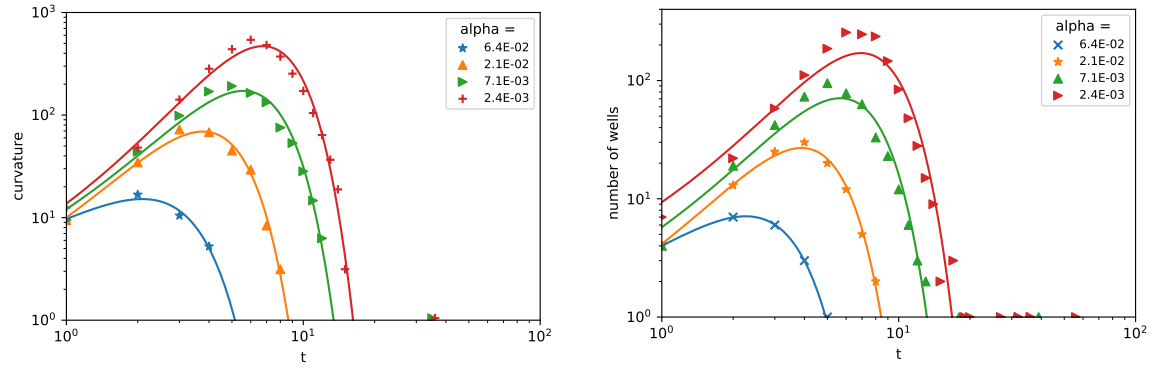
La condition initiale choisie est la même qu'en section 3, cependant β est désormais choisi comme une fonction de α , puisque ces constantes sont liées à l'élasticité de la surface triangulée et qu'en physique l'élasticité est donnée par une seule constante, intervenant à la fois dans l'étirement et la relaxation. Nous avons donc effectué des simulations pour $\beta = \alpha$, $\beta = 1 - \alpha$ et $\beta = 3\alpha$. Si les résultats observés pour ces trois relations sont analogues à ceux décrits ci-dessous, la relation $\beta = 3\alpha$ donne les meilleurs résultats en termes d'interprétation physique : c'est donc pour celle-là que nous les décrivons dans la suite (puisque l'objectif était de calibrer les constantes α et β pour obtenir le meilleur couplage possible et non d'avoir des bons résultats pour toutes les valeurs de ces constantes).

Deux quantités ont été mesurées :

- pour étudier la structure du réseau lui-même, nous avons mesuré sa courbure de Ricci : la courbure d'un sommet partagé par n triangles est égale à $2\pi - n\pi/3$ et la courbure globale du réseau est la somme des courbures des sommets. Ainsi le réseau plat est de courbure nulle, appliquer un 1-to-3 *Pachner move* sur un triangle diminue la courbure locale de ses sommets de $\pi/3$ et crée un sommet de courbure π en son centre, et inversement pour les 3-to-1 *Pachner move*. On en déduit notamment que la courbure du réseau est constante et égale à 0, en accord avec le théorème de Gauss-Bonnet. Ainsi seule la courbure locale est significative, et nous avons donc aussi mesuré le nombre total de puits dans le réseau pour avoir une donnée globable.
- pour étudier le marcheur lui-même, nous avons étudié la variance de son abscisse et de son ordonnée. Plus précisément, puisque nous cherchions une loi polynomiale, nous avons mesuré la quantité $\frac{d \log \text{Var } x}{dt}$ et de même pour y . Pour la marche quantique sur le réseau triangulaire plat, cette quantité converge dans les deux cas vers 2.

5.2 Résultats

La courbure locale d'une boule de rayon 1 évolue toujours selon le même modèle, quelles que soient les valeurs de α et β (suffisamment petites pour qu'il y ait des *Pachner moves*) choisies (figure 9a) : (i) la courbure augmente polynomialement : la particule est localisée et la surface s'étire ; (ii) la courbure décroît vite, en e^{-bt^2} : la particule n'est plus localisée et la surface se relâche ; (iii) quelques puits apparaissent mais disparaissent immédiatement ; (iv) la courbure locale est finalement constante et égale à zéro : la particule est complètement délocalisée et il n'y a plus aucun *Pachner move*. Le réseau a alors atteint son état final : il est devenu plat. Le nombre total de puits suit le même modèle (figure 9b).



(a) Courbure locale du réseau dans une boule de rayon 1 lorsque $\beta = 3\alpha$, modélisée comme $t^a e^{-bt^2} c$. (b) Nombre total de puits du réseau lorsque $\beta = 3\alpha$, modélisé comme $t^a e^{-bt^2} c$.

FIGURE 9 – Le réseau évolue toujours selon les mêmes principes.

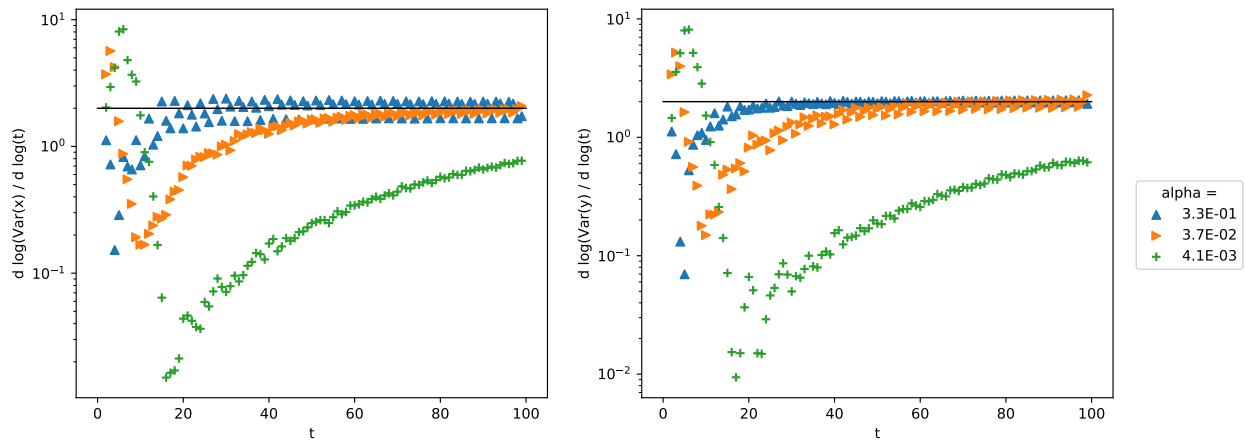
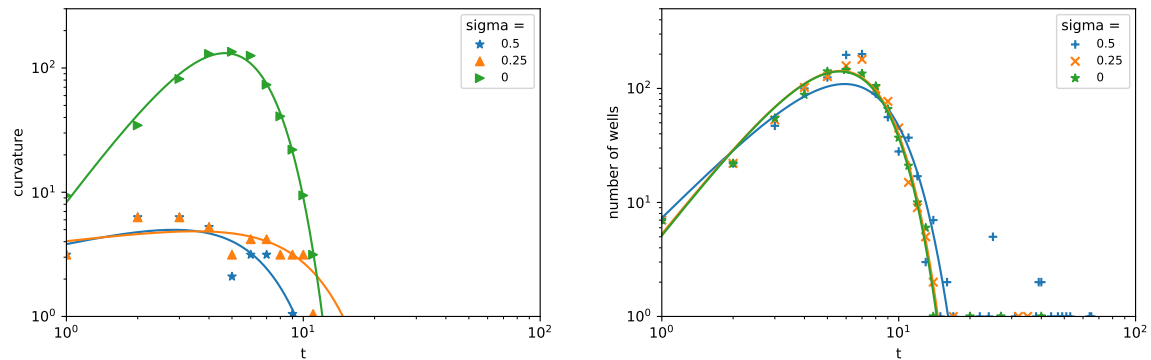


FIGURE 10 – Dérivée du logarithme de la variance lorsque $\beta = 3\alpha$: elle converge toujours vers 2.



(a) Courbure dans une boule de rayon 1 pour α centré en $\alpha_0 = 3^{-3}$ et $\beta = 3\alpha$. (b) Nombre de puits pour α centré en $\alpha_0 = 3^{-3}$ et $\beta = 3\alpha$.

FIGURE 11 – Le couplage résiste au bruit.

Puisque pour $t \gg 1$ le réseau est plat, le marcheur se comporte comme le marcheur décrit en section 1. L'évolution de la variance confirme ce résultat, puisqu'elle finit toujours par croître de manière quadratique (figure 10).

Notre conjecture confirmée, il fallait désormais déterminer si notre modèle était résistant au bruit (toujours pour être en accord avec la théorie de la relativité générale). Pour cela, nous avons ajouté un bruit à la valeur de α , en considérant $\alpha = \alpha_0 e^{x(t)}$ avec $x(t) \hookrightarrow \mathcal{U}([-σ/2, σ/2])$, afin de produire des fluctuations aléatoires de la triangulation et donc de la courbure locale. Dans ce nouveau contexte, on observe toujours le même modèle 11, même si ses paramètres peuvent changer drastiquement : le couplage résiste donc au bruit, et l'ordre dans lequel on effectue les *Pachner moves* n'a probablement pas d'influence sur l'évolution de la métrique.

La propriété principale que nous avons découverte est que la courbure locale dans une boule de rayon 1 ainsi que le nombre de puits se comportent tous deux comme $t \mapsto ct^a e^{-bt^2}$, que ce soit dans le cas déterministe ou aléatoire. Ce fait est particulièrement intéressant car la décroissance exponentielle (e^{-bt^2}) peut être trouvée dans de multiples modèles à travers la physique, pour lesquels la constante b est alors une constante associée à une coupure interne du système. Il paraissait donc naturel que b soit une fonction de α . C'est ce que nous avons pu confirmer par une régression (figure 12) qui suggère que $1/b$ est proportionnel au logarithme de α (le coefficient de proportionnalité dépendant de la relation entre α et β), et de même pour l'instant de transition entre la phase de décroissance exponentielle et la phase de fluctuation (**tmax** sur les graphes). Le fait que ces constantes soient les mêmes dans le modèle de la courbure et le modèle du nombre de puits confirme de plus l'idée selon laquelle elles sont liées aux paramètres physiques du réseau.

Toutes nos simulations n'ont cependant pas donné d'aussi bons résultats que les précédentes : par exemple, nous espérons que le nombre de puits croisse en $t^{1/3}$ (c'est-à-dire avoir $a = 1/3$) puisqu'une autre étude étudiant un couplage entre particules classiques et *Pachner moves* [9] avait constaté une telle croissance et l'avait démontré formellement sous certaines hypothèses. Il est cependant normal que ces croissances ne soit pas les mêmes car on ne peut pas vraiment faire d'analogie entre les conditions provoquant les *Pachner moves* dans les deux couplages.

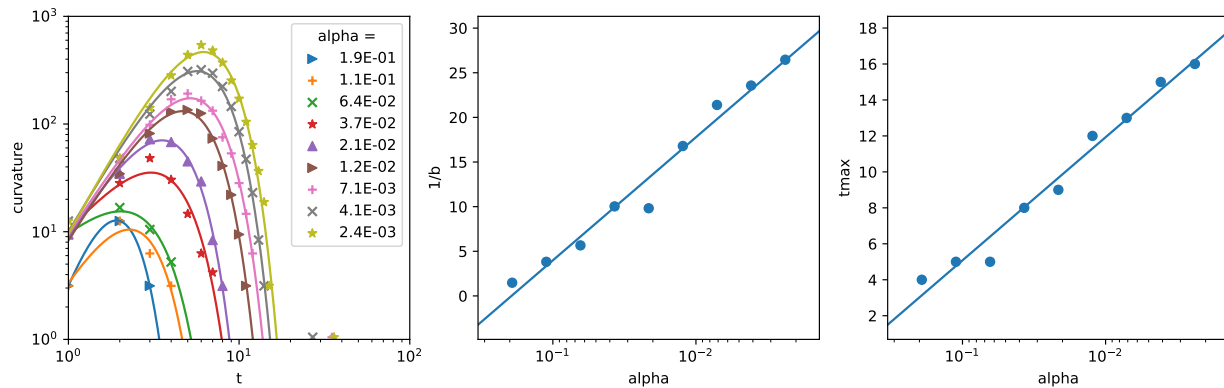
Malgré tout, les résultats obtenus restent intéressants et ont ainsi fait l'objet de l'écriture d'un article [1] soumis au journal *Theoretical Computer Science* dans la section *Theory of Natural Computing*.

6 Conclusion et perspectives

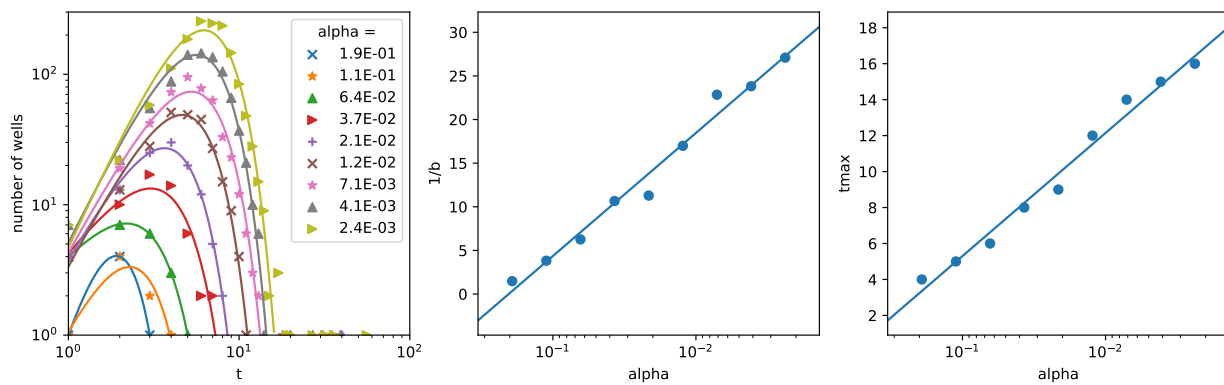
J'ai ainsi étendu la marche quantique sur le réseau triangulaire plat à un réseau triangulaire dynamique sujet à des *Pachner moves*, répondant plus ou moins au cahier des charges de mon encadrant. Ce dernier m'a ensuite fait étudier ce marcheur à la fois formellement et numériquement afin d'obtenir un modèle de son comportement, qu'il s'est ensuite chargé d'interpréter physiquement. Nous avons ainsi observé que la courbure du réseau suit d'abord une loi en $ct^a e^{-bt^2}$ avant de s'annuler, le marcheur se comportant alors comme le marcheur quantique sur le réseau triangulaire plat. Ces résultats réminiscent de la relativité générale ont donné lieu à l'écriture d'un article que nous espérons voir publié prochainement [1].

Si l'étude de ce marcheur n'est pas terminée (nous pensons notamment qu'il est possible d'intégrer les 2-to-2 *Pachner moves* et d'obtenir des équations analytiques en se permettant certaines hypothèses), nous pensons qu'il est déjà possible de le généraliser, par exemple en considérant la propagation de plusieurs particules ou un réseau triangulaire en haute dimension (comme un tétraèdre) où la courbure globale n'est plus nulle.

En plus de m'initier au vaste domaine qu'est le calcul naturel, ce stage m'a donc aussi permis de mieux comprendre le monde de la recherche et d'appliquer mes connaissances théoriques à un problème pratique.



(a) Courbure dans une boule de rayon 1 lorsque $\beta = 3\alpha$



(b) Nombre de puits lorsque $\beta = 3\alpha$

FIGURE 12 – Les valeurs b et t_{\max} comme fonctions de α

Références

- [1] Quentin ARISTOTE et Giuseppe DI MOLFETTA. « Quantum Walk over a triangular lattice subject to Pachner moves ». In : *arXiv e-print* (juil. 2019). arXiv : 1907.10717 [quant-ph].
- [2] Pablo ARRIGHI et al. « Dirac equation as a quantum walk over the honeycomb and triangular lattices ». In : *Physical Review A* 97.6 (juin 2018). DOI : 10.1103/physreva.97.062111. arXiv : 1803.01015 [quant-ph].
- [3] Pablo ARRIGHI et al. « From curved spacetime to spacetime-dependent local unitaries over the honeycomb and triangular Quantum Walks ». In : *Scientific Reports* 9.1 (juil. 2019). DOI : 10.1038/s41598-019-47535-4. arXiv : 1812.02601 [quant-ph].
- [4] Pablo ARRIGHI, Simon MARTIEL et Zizhu WANG. « Causal Dynamics of Discrete Surfaces ». In : *Electronic Proceedings in Theoretical Computer Science* 144 (mar. 2014), p. 30-40. DOI : 10.4204/eptcs.144.3. arXiv : 1404.0083 [cs.DM].
- [5] Quentin ARISTOTE. Juil. 2019. URL : <https://git.eleves.ens.fr/qaristote/triangular-lattice>.
- [6] Pablo ARRIGHI, Simon MARTIEL et Vincent NESME. « Cellular automata over generalized Cayley graphs ». In : *Mathematical Structures in Computer Science* 28.3 (mai 2017), p. 340-383. DOI : 10.1017/s0960129517000044. arXiv : 1212.0027 [cs.DM].

- [7] Quentin ARISTOTE. *Dynamiques Causales de Graphes*. Juin 2019. URL : <https://git.eleves.ens.fr/qaristote/causal-graph-dynamics/blob/master/cgd.pdf>.
- [8] John M. SULLIVAN. « Curvature measures for discrete surfaces ». In : *ACM SIGGRAPH 2005 Courses on - SIGGRAPH '05*. ACM Press, 2005. DOI : 10.1145/1198555.1198662. arXiv : 0710.4497 [math.DG].
- [9] Anna KLALES et al. « Lattice gas simulations of dynamical geometry in two dimensions ». In : *Physical Review E* 82.4 (oct. 2010). DOI : 10.1103/physreve.82.046705. arXiv : 1002.4841 [cond-mat.soft].