

**Titre:** Rupture et restauration de symétrie pour les problèmes à plusieurs corps traités sur ordinateurs quantiques

**Mots clés:** Computation quantique, Problème à plusieurs corps, Brisure de Symétrie/Restauration de Symétrie.

**Résumé:** La méthode de Brisure de Symétrie/Restauration de Symétrie est un outil largement utilisé pour traiter un ensemble de particules en interaction. Cette méthode permet souvent d'améliorer l'approximation de l'énergie de l'état fondamental d'un Hamiltonien dans un cadre variationnel. Dans cette technique, certaines symétries du système sont brisées intentionnellement dans la fonction d'onde utilisée lors de la recherche de l'état fondamental. Ce processus permet de capturer des corrélations complexes entre les particules à un coût numérique plus faible par rapport à un cadre qui préserve ces symétries. Étant donné que le véritable état fondamental doit respecter les symétries du problème, une étape de restauration de symétrie est a priori nécessaire pour revenir dans le sous-espace approprié de l'espace de Hilbert total.

Cette thèse examine comment mettre en œuvre le schéma de Brisure de Symétrie/Restauration de Symétrie à l'aide d'ordinateurs quantiques. L'algorithme quantique que nous utilisons pour la composante variationnelle est la méthode de "Variational Quantum Eigensolver (VQE)". Son but est de préparer une approximation de l'état fondamental en utilisant une fonction d'onde paramétrisée afin de minimiser l'énergie associée au Hamiltonien. L'ansatz quantique de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) a été utilisé comme ansatz brisant les symétries, et les techniques développées ont été testées en utilisant les Hamiltoniens d'appariement et le modèle de Hubbard. Nous avons également utilisé la transformation de Jordan-Wigner pour encoder les opérateurs présents dans le Hamiltonien. Avec ces outils, à l'instar des calculs sur ordinateurs classiques, deux manières d'utiliser le processus de Brisure de Symétrie/Restauration de Symétrie en conjonction avec la méthode VQE sont développés : nous pouvons varier les paramètres d'un ansatz de Brisure de Symétrie avant ou après la restauration de symétrie. La première approche est identifiée comme Projection Quantique Après Variation, tandis que la

dernière est nommée Variation Quantique Après Projection.

L'un des aboutissements de cette thèse est le développement de diverses techniques pour la restauration de symétrie. Certaines d'entre elles sont basées sur l'algorithme d'Estimation de Phase Quantique (QPE), ce qui comprend les méthodes de QPE itérative et de Rodéo. Nous avons également étudié d'autres techniques basées sur le concept "d'Oracles quantiques", telles que les méthodes Oracle+Hadamard et Grover-Hoyer. L'algorithme de Combinaison Linéaire d'opérateurs Unitaires a été utilisé pour implémenter directement soit la projection, soit l'oracle. Nous avons également adapté le formalisme de "Classical Shadows" pour la restauration de symétries dans le but d'optimiser les ressources quantiques nécessaires. Les différentes méthodes de restauration de symétrie sont illustrées à travers la thèse pour les symétries associées au nombre de particules et au spin total.

Dans la dernière partie de la thèse, des techniques dites hybrides quantiques-classiques sont présentées, qui peuvent aider à extraire des informations précieuses sur le spectre de basse énergie du Hamiltonien. En supposant qu'il est possible d'extraire avec précision les moments du Hamiltonien à partir de leur fonction génératrice à l'aide d'un ordinateur quantique, nous introduisons deux méthodes d'analyse des spectres : la méthode de t-expansion, qui combine l'évolution en temps imaginaire et l'approximation de Padé, et la méthode de Krylov, une méthode d'expansion du sous-espace quantique qui peut fournir des informations sur les valeurs propres du Hamiltonien et sur l'évolution de la probabilité de survie. De plus, nous présentons également des résultats de la méthode Krylov Quantique. Cette technique donne des informations similaires à la méthode de Krylov, mais sans avoir besoin d'estimer les moments du Hamiltonien, une tâche qui reste difficile dans les ordinateurs quantiques actuels.