

La simulation quantique : une introduction

Michèle Leduc (michele.leduc@lkb.ens.fr),

Laboratoire Kastler Brossel, École normale supérieure, 24 rue Lhomond, 75005 Paris

Cet article poursuit les analyses proposées par *Reflets de la Physique* sur les sciences et technologies quantiques à l'honneur dans le cadre de la célébration des 100 ans de la physique quantique lancée en février 2025. Après une introduction historique sur la physique quantique d'Elisabeth Jacobino (n°81), un entretien avec Sara Ducci sur la communication quantique (n°82), un résumé des interprétations de la mécanique quantique par Franck Laloë (n°83), voici un point sur la simulation quantique.

Cet article vient dans ce numéro de *Reflets de la Physique* en complément de ceux de Thierry Lahaye sur le calcul et la simulation quantiques avec des matrices d'atomes de Rydberg, page 7, et de David Wilkowski et Vincent Mancois sur les atomes ultrafroids piégés dans des champs optiques superoscillants, page 12.

Il se présente comme un panorama très général des objectifs et des méthodes de ce riche domaine de la physique où s'impliquent avec succès un nombre important de laboratoires et de *startups* en France.

Les objectifs de la simulation quantique

Pour présenter l'ambition de ce pilier fondamental des technologies quantiques, citons l'introduction d'un article paru dans *Reflets de la Physique* en 2022^(a) :

« La compréhension de la matière, des objets, plus généralement des systèmes physiques qui nous entourent peut se révéler ardue. C'est notamment le cas des systèmes à N corps, présentant des propriétés émergentes : le comportement de l'ensemble ne se déduit pas de celui des constituants élémentaires seuls. Ces systèmes sont multiples, des noyaux aux naines blanches, en passant par les supraconducteurs, et pour beaucoup d'entre eux, comprendre leur comportement est d'un intérêt majeur, scientifique et technologique ».

Dans cet article de référence, les auteurs soulignent les limites des observations pour comprendre ces systèmes à N corps : ainsi, pour la matière à l'état solide, on ne peut faire que des mesures d'ensemble et non pas sur chaque particule constituant le matériau. Certes, on peut envisager des simulations numériques, mais la complexité du calcul croît de façon polynomiale avec N, et encore plus dramatiquement

(exponentiellement) avec N dans le monde quantique, où chaque particule peut occuper plusieurs états simultanément d'après le principe de superposition. Les supercalculateurs modernes ne peuvent décrire l'état d'un tel système au-delà de quelques dizaines de particules. Appréhender sa dynamique temporelle reste largement hors de portée ou requiert d'importantes simplifications. La simulation numérique classique étant limitée à de faibles valeurs de N, il peut être profitable de la remplacer par la méthode alternative qu'est la simulation quantique.

Voici le moment de citer Richard Feynman qui en énonça le principe au début des années 1980 :

"I'm not happy with all the analyses that go with just the classical theory, because nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy."^(b)

L'idée de base de la simulation quantique est simple : elle consiste à utiliser un système quantique contrôlable pour imiter le comportement du système d'intérêt réel, lui aussi quantique, mais beaucoup plus complexe. Le système « simulateur » est



Richard Feynman en 1984.

façonnable et contrôlable à loisir, car ses constituants élémentaires peuvent être facilement manipulés et observés. Il se comporte comme le système original, est régi par les mêmes équations, mais présente l'avantage que le physicien a sur lui un contrôle total.

La méthode est utilisée pour comprendre les propriétés de molécules en chimie quantique, de certains éléments en biologie, de matériaux exotiques comme ceux qui servent pour la communication quantique

ou la physique de l'état solide. Pour la matière condensée, différents phénomènes macroscopiques peuvent ainsi être caractérisés, comme des transitions de phase, par exemple en magnétisme (apparition du ferro ou antiferromagnétisme). Un intérêt particulier s'attache aux matériaux supraconducteurs à basse température, qui font depuis des décennies l'objet de recherches toujours sujettes à de grandes frustrations. Le Graal est de comprendre suffisamment leurs propriétés pour imaginer la composition et la structure de nouveaux matériaux qui seraient supraconducteurs à température ambiante (la limite actuelle est de -135°C à pression atmosphérique). Le problème difficile à résoudre est celui des corrélations quantiques qui existent entre les constituants élémentaires du matériau, en particulier les électrons.

Au-delà de ces exemples en physique ou en chimie où l'application est directe, la simulation quantique peut aussi être appropriée pour la résolution de problèmes d'optimisation à multiples paramètres corrélés, qui reviennent à trouver le minimum d'un estimateur et qu'on peut calquer par analogie sur un problème physique, notamment un système de *spins* en interaction. Ces problèmes se retrouvent partout dans l'industrie (optimisation de réseaux, par exemple) ou dans la banque et dans l'assurance (minimisation de risques). En témoignent les nombreuses collaborations entre grandes compagnies (Airbus, Thales, EDF, Crédit Agricole...) et *start-ups* (Pasqal, Quandela, WeLinq...).

Comment mettre en œuvre la simulation quantique ?

Un dossier spécial dans un numéro de *Nature Physics* cite quelques plateformes de simulation quantique avec des atomes neutres, des ions, des photons et des circuits supraconducteurs (la liste n'est pas exhaustive)^(c). Ces plateformes ne sont pas vraiment en concurrence ; chacune fournit des éléments complémentaires et leurs visions s'enrichissent les unes les autres. D'une façon générale, et quelle que soit la nature de la plateforme de simulation, il faut commencer par une mise en perspective de la méthode en énonçant les caractéristiques d'un système quantique qui va servir de simulateur^(d):



[...] la simulation quantique [...] consiste à utiliser un système quantique contrôlable pour imiter le comportement du système d'intérêt réel, lui aussi quantique, mais beaucoup plus complexe.



- Le simulateur quantique possède un système de bosons ou/et de fermions avec ou sans degré de liberté interne. Les particules sont piégées dans un réseau ou au moins confinées dans une région de l'espace. Le système dans son ensemble possède un grand nombre de degrés de liberté.
- Le simulateur quantique doit pouvoir se préparer (approximativement) dans un état quantique connu, idéalement un état pur, bien que dans certains cas il puisse être intéressant d'étudier la dynamique d'un mélange statistique.
- Il faut pouvoir mettre en œuvre des interactions avec des champs extérieurs ou entre les différentes particules, et ceci avec des paramètres accordables. Les interactions peuvent être locales (c'est-à-dire entre particules voisines) ou à longue portée. Le simulateur peut comporter un réservoir s'il s'agit de simuler la dynamique de systèmes ouverts.
- Il faut pouvoir faire des mesures sur le système, soit en sondant quelques sites particuliers sur un réseau, soit par une mesure collective qui ne sonde pas les sites individuels. Idéalement, il faudrait pouvoir faire une seule mesure et pouvoir la répéter.
- La vérification de la simulation quantique est impossible, sauf si on peut la comparer à la solution trouvée classiquement (mais alors quel est l'intérêt de faire une simulation quantique ?). Toutefois, on peut, par exemple, augmenter le taux de confiance en faisant fonctionner le simulateur pour des problèmes dont les solutions sont connues et augmenter progressivement la taille du système ou la durée de la simulation.

Les plateformes pour la simulation quantique

Avec des atomes froids^(e,f)

Les atomes froids sont des gaz très dilués, à des températures proches du zéro absolu, confinés dans des pièges immatériels faits de lasers et de champs magnétiques, parfaitement isolés de leur environnement. Du fait des interférences entre les ondes atomiques, les atomes en nombre important (des milliers, voire des centaines de milliers) peuvent constituer des échantillons macroscopiques. Les interactions entre particules peuvent dépendre de leur état interne (l'orientation de leur *spin*) et on peut les faire varier à volonté avec des champs magnétiques (résonances de Feshbach). La disposition des atomes peut être libre, par exemple dans une boîte optique en 2D^(a), ou bien ordonnée dans des réseaux optiques. De tels réseaux sont faits d'ondes stationnaires de lumière où les atomes se piègent dans des sites adjacents, reproduisant en pratique un système de *spins* localisés en réseau. Une alternative consiste à piéger les atomes froids un par un avec des pinces optiques en contrôlant très précisément leur position. Les atomes froids portés par laser dans des états de Rydberg très excités ont entre eux des interactions fortes à longue portée. Ils fournissent depuis quelques années des systèmes de simulation quantique très prometteurs (voir l'article de T. Lahaye, page 7). Les systèmes à atomes froids sont avant tout employés pour simuler le magnétisme quantique, la dynamique non linéaire et la physique des matériaux fortement corrélés.

>>>

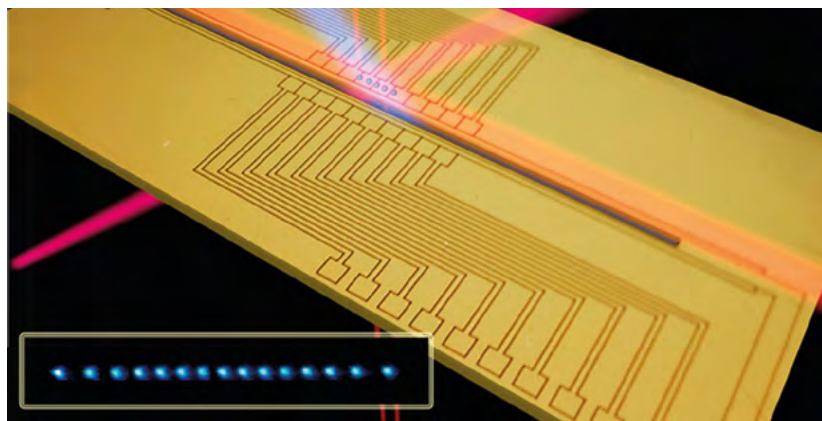


Image d'ions calcium en ligne, refroidis et contrôlés dans un piège électromagnétique (on parle de piège de Paul). Au sein du piège, deux ions voisins sont séparés par 10-20 μm . Le piège est réalisé sur une puce électronique, où des fils parcourus par des courants créent les champs électriques et magnétiques nécessaires au piégeage. Les ions à l'intérieur du piège sont détectés par fluorescence à l'aide d'un faisceau laser (ici en bleu). Le système sert pour la simulation et le calcul quantiques. (Courtoisie : Rainer Blatt, IQOQI, Innsbruck.)

>>>

Avec des ions^(g)

Les ions piégés sont plutôt utilisés pour simuler la dynamique des *qubits* dans un système de calcul quantique. On utilise des ions dans le vide, maintenus en place par des pièges électromagnétiques et on les manipule avec des lasers. Les ions sont alignés en chaîne et vibrent autour de leur position d'équilibre. On code un *qubit* pour la simulation sur les deux états internes de l'ion (par exemple deux niveaux d'énergie électronique, qui sont stables). On détecte leur état par leur fluorescence. On crée artificiellement des interactions entre les ions avec des lasers qui couplent l'état interne de l'ion avec son mouvement. Les modes de vibration étant collectifs, les interactions effectives ion-ion se propagent sur toute la chaîne. On programme les lasers en fonction de la physique qu'on veut simuler, de telle sorte que le système obéisse à un Hamiltonien cible, par exemple le modèle d'Ising ou celui de Heisenberg.

La simulation peut être simplement analogique (le Hamiltonien construit ressemble au vrai), et on observe alors l'évolution naturelle du système, ou numérique (l'évolution est décomposée en séquences stroboscopiques). Le contrôle des interactions à longue portée est ultraprécis, mais le système a une taille limitée (une centaine d'ions). La méthode est bien adaptée à la simulation de la dynamique des *qubits* dans un ordinateur quantique et en général à celle des systèmes hors d'équilibre.

Avec des photons^(h)

On peut utiliser des photons comme porteurs de l'interaction quantique, avec l'avantage qu'ils sont facilement manipulables et qu'ils interagissent très peu avec l'environnement. Un photon peut coder un *qubit* par sa polarisation ou par le chemin qu'il prend, A ou B, ou par ses modes spatiaux ou orbitaux. Les sources sont des photons uniques ou des paires de photons

intriqués. Pour obtenir une interaction effective entre ces photons, on peut les faire passer dans des interféromètres ou des circuits optiques intégrés où leurs amplitudes de probabilité interfèrent, ou bien les envoyer dans un milieu non linéaire où les interactions entre particules matérielles génèrent une interaction effective entre photons. Comme avec les ions, la simulation peut être analogique pour reproduire un Hamiltonien donné ou bien numérique avec les circuits intégrés. L'avantage de ces méthodes est la faible décohérence et un fonctionnement à température ambiante.

Avec des circuits supraconducteurs⁽ⁱ⁾

Le principe est le même que pour le simulateur quantique à base d'ions piégés. Un circuit supraconducteur est constitué d'électrodes en matériaux supraconducteurs, gravées sur une puce, qui se comporte quantiquement (il présente des niveaux d'énergie discrets). Il est fait d'un métal supraconducteur comme l'aluminium et fonctionne à température très basse. Au cœur de chaque *qubit*, on trouve une jonction Josephson qui introduit une non-linéarité quantique et permet au circuit de fonctionner en *qubit* sur deux états distincts. Le pilotage et la mesure sont effectués par des impulsions micro-ondes. Ces *qubits* sont des briques de base du calcul quantique. Utilisés en réseau pour constituer un système simulateur, les *qubits* sont réglés pour imiter les interactions dans le système réel que l'on simule. Comme avec les ions, la simulation peut être analogique ou numérique. On les utilise beaucoup pour simuler le magnétisme quantique et ils sont prometteurs pour la chimie quantique. Leurs résultats sont très précis, mais ils sont très sensibles au bruit et à la décohérence. Leur utilisation comme simulateur est aussi, comme pour les ions, limitée par le nombre réduit de tels éléments qu'on peut faire fonctionner en réseau.

Pour conclure

Citons de nouveau l'article de Yefsah et Sayrin :

« Le caractère disruptif de la simulation quantique consiste à élucider les mystères de la physique quantique en la mettant elle-même à contribution, ce que d'aucuns appellent la seconde révolution quantique ». ■

(a) T. Yefsah et C. Sayrin, « Simulation quantique avec des atomes froids. Comment manipuler et sonder des systèmes à l'échelle de l'atome individuel », *Reflète de la Physique* **71** (2022) 8-15.

(b) On peut traduire approximativement par : « Je ne me satisfais pas de toutes ces modélisations qui reposent uniquement sur la physique classique, parce que la nature n'est pas classique, bon sang, et si vous voulez faire une simulation de la nature, vous avez intérêt à ce qu'elle soit quantique, et ma foi c'est un problème merveilleux parce que ça n'a pas l'air si facile. »

(c) *Nature Physics* **8** (2012), 2 avril 2012

(d) Nous reprenons ici des éléments de l'article des théoriciens I. Cirac et P. Zoller : *Nature Physics* **8** (2012) 264-267

(e) I. Bloch, J. Dalibard et S. Nascimbène, *Nature Physics* **8** (2012) 267-276

(f) Voir le chapitre 4 rédigé par B. Laburthe-Tolra, T. Lahaye et H. Perrin dans *le livre Atomes, ions, molécules ultrafroids et technologies quantiques*, EDP Sciences (2020).

(g) R. Blatt and C. Ross, *Nature Physics* **8** (2012) 277-284

(h) A. Aspuru-Guzik and P. Walther, *Nature Physics* **8** (2012) 285-292

(i) A. A. Houck, H. E. Türeci and J. Koch, *Nature Physics* **8** (2012) 292-299