



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Comptes Rendus Physique

www.sciencedirect.com

Quantum Simulation / *Simulation quantique*

Quantum simulation: From basic principles to applications

Foreword



Envisioned by Richard Feynman in the early 1980s, quantum simulation has received dramatic impetus thanks to the development of a variety of platforms able to emulate a wide class of quantum Hamiltonians. During the past decade, most of the quantum simulators have implemented rather well-known models, hence permitting a direct comparison with theoretical calculations and a precise benchmarking of their reliability. The field has now reached a maturity such that one can address difficult problems, which cannot be solved efficiently using classical algorithms. These advances provide unprecedented opportunities to explore previously unreachable fields, test theoretical predictions, and inspire novel approaches.

This contribution is an elementary introduction to quantum simulation. We discuss the challenges, define both digital and analog quantum simulators, and list the demanding conditions they require. We also provide a brief account of the contributions gathered in the dossier on *Quantum simulation* in the *Compte rendu Physique* of the French Academy of Sciences [1–6]. The latter completes excellent reviews that appeared previously, see for instance Refs. [7–14].

Universal models and the role of simulations in many-body physics

Understanding the behavior of macroscopic quantum systems is a major challenge of modern physics. The basic laws of low-energy physics are by now quite well known at the microscopic, say atomic, scale. Conversely, many fundamental questions remain open, and even debated, about the collective dynamics at the macroscopic scale. By “macroscopic scale”, here we mean systems made up of a huge number of constituents, or degrees of freedom, say 10^6 , 10^{23} , or even more, as relevant in condensed matter physics or in astrophysics, for instance. Such huge systems cannot be treated exactly, be it at the classical level and, even worse, at the quantum level. Yet, it is the main outcome of the thermodynamic approach that the collective behavior of a macroscopic system can drastically differ from that of its elementary constituents. For instance, the elementary interactions between the H_2O molecules are fundamentally unchanged when a water bucket turns from the liquid phase to the solid phase at zero degree Celsius. Similarly, the interactions between the microscopic magnetic moments do not show any brutal change when a magnetic material gets magnetized underneath the Curie temperature. Hence, the dramatic effects observed in macroscopic systems are governed by large-scale instabilities, without obvious counterparts at the microscopic level. This observation takes a universal character, summarized in the celebrated motto “More is Different” [15]. Such so-called emerging phenomena also appear in quantum systems, where new effects that are impossible in the classical world show up below some critical temperature or at zero temperature when some interaction parameter passes through a critical value. Celebrated examples include the superfluid Λ transition in helium or super-conducting transitions and other metal–insulator transitions in electronic systems.

Strikingly enough at first sight, while emerging phenomena only appear in very large scale macroscopic systems, their germs are contained in the mutual interactions of their elementary constituents. Hence, local two-body interactions are sufficient to explain a huge class of phase transitions, such as the liquid–solid and magnetic transitions mentioned above. The Boltzmann statistical approach proved particularly successful in describing this connection between the microscopic and macroscopic scales. To understand emerging phenomena on grounds as fundamental as possible, the programme is now well established: One tries to identify the basic microscopic terms that seem to be relevant and disregards all the other microscopic details. One then elaborates a model, as generic as possible, likely to reproduce the main experimental observations. The most usual examples are the Ising and Heisenberg models for magnetic transitions, or the Hubbard model for metal–insulator transitions [16–18]. Then all is left to do is to check that the phenomenon of interest indeed emerges from the dynamics of the simplified model. The realization of this programme is nothing but a *simulation*. It consists in building up a simplified system that mimics the main properties of a real system.

<https://doi.org/10.1016/j.crhy.2018.11.005>

1631-0705/© 2018 Published by Elsevier Masson SAS on behalf of Académie des sciences.

The difficulty of simulating generic quantum systems using classical computers

Unfortunately, severe problems usually appear at the last stage because limiting ourselves to a *simple model* does not guarantee that the solution is straightforward. In a few cases, exact solutions are known, a significant class of which is Bethe-ansatz integrable models. In some other cases, it is possible to make relevant approximations and build up tractable theories that yield accurate predictions. This is the case of mean field approximations, which work well to explain some superfluid transitions for instance. In most cases, however, exact or quasi-exact solutions are not known. One then traditionally resorts to *numerical simulations*. In this respect, the development of advanced approaches, such as Monte Carlo techniques, density functional theory, molecular dynamics, tensor-network approaches, and dynamical mean field theory, to name a few, have dramatically contributed to enlarging the class of models whose solution is known. However, even the most advanced numerical approaches have their own limitations and use approximations or representations that do not hold in all cases. Then, it is necessary to turn to exact computations. While it may be possible for some reasonably large classical systems, it is practically impossible for a quantum system.

Consider the most simple example put forward by Richard Feynman in Ref. [19] of a system made of N spins $1/2$. Since each spin can be either in the spin-up or spin-down state, there are 2^N possible configurations. A pure classical state is parametrized by N binary numbers, the values of which, 0 or 1, represent the state of each spin. A computer with a memory of $100\text{Go} \sim 10^{12}$ bits can thus efficiently simulate about 10^{12} spins $1/2$. Conversely, a generic pure quantum state is the coherent superposition of all the possible configurations. This requires 2^N \mathbb{C} -coefficients and the same memory of 100Go can only store the spin state of only $\log(10^{12})/\log(2) \sim 40$ particles. It is thus impossible to simulate the exact quantum state of more than a few tens of spins. More generally, it is practically impossible to store and manipulate the state of a macroscopic quantum system, owing to the exponential growth of its Hilbert space in the system's physical size.

A careful reader might note that a similar issue occurs if one wants to simulate the full statistical distribution of the classical counterpart of the same spin systems. In this case, one would need to store the probabilities of each of the 2^N configurations, the number of which also grows exponentially with the number of constituents, N . However, this issue can be easily solved by using a stochastic algorithm, which amounts to introduce random jumps between the configurations. This is what Monte Carlo algorithms do for instance. Then, relevant quantities may be found by running the simulation a large, but not exponentially large, number of times, and averaging the results. As noticed by Feynman, this just simulates what Nature indeed does when we acquire experimental data [19].

The issue is much more serious in the quantum world, because even pure states cannot be simulated efficiently on truly large scales. Then, Feynman pointed out that the only reasonable thing to do is to make the computer quantum itself. Then, the register would naturally be exponentially large in the number of bits and one would be able to store an exponentially large number of coefficients [19]. Feynman also postulated that it should be possible to simulate the time evolution of any quantum system in a reasonable computer time. This statement was proven for local quantum Hamiltonians a few years later [20]. Seth Lloyd showed that the simulation can be performed with arbitrary precision in a computer time that grows at most polynomially with the physical time, using Trotter–Suzuki's decomposition of the many-body evolution operator into sequences of local Hamiltonian evolutions. A machine, exploiting quantum resources to simulate a given quantum model, is called a *quantum simulator*.

Up to now, we have focused on the dynamics of many-body systems at thermodynamic equilibrium. However, similar questions and challenges appear when one considers the unitary time evolution of large systems. Realizing quantum simulations in this case is actually even more important for several reasons. On the one hand, we do not know (yet) a universal approach, which would be the out-of-equilibrium counterpart of what is statistical physics for equilibrium thermodynamics. It follows that many questions are still completely open, regarding for instance the spreading of information or the thermalization of these systems. On the other hand, out-of-equilibrium quantum systems are likely to develop an entanglement entropy that grows unbounded during the time evolution. It results that simulations using classical machines rapidly reach their limits.

What is a quantum simulator?

Building up a quantum simulator is still a *tour de force*. Of course, the aim here is not to reproduce exactly the initial system, for instance a complete material with all its microscopic details. Should we do this, we would loop back to the initial problem and we would gain no information about the relevance of the theoretical model. In the best case, we would address the specific initial problem and miss the basic physical ingredients at the origin of the considered phenomenon. Instead, the aim here is to build up a clean system, exactly governed by a basic model Hamiltonian. The latter is proposed in a theoretical context to reproduce some physical phenomenon observed in a class of real systems. This is the basic idea of quantum simulation.

More precisely, a quantum simulator is a controlled device that allows us to (i) engineer a class of quantum Hamiltonians exactly, (ii) control its dynamics, and (iii) make sufficiently precise measurements to consider that the problem is solved. In practice, a quantum simulator is useful provided it is able to solve a hard problem. In this context, one considers that a problem is “hard” when it cannot be solved, either analytically or numerically with a classical computer in a time that grows at most as a power of the system's size. This feature is often retained as the main criterion for a quantum simulator. However, it cannot be considered a perennial definition owing to continuous progress in many-body analytical and numerical approaches. In fact, it is very hard to prove that a given quantum problem cannot be solved with a classical algorithm in polynomial time. However, it is a common belief that a large amount of entanglement is a good working criterion.

Such a situation appears, for instance, in the vicinity of quantum phase transitions, in gapless systems at equilibrium or in far-from-equilibrium systems where the entanglement may grow unbounded during the time evolution. The applications of quantum simulation are potentially unlimited and range from condensed-matter and high-energy physics to chemistry, biology, and cosmology, for instance [7,8,21].

To be more specific, one distinguishes two classes of quantum simulators:

Digital quantum simulators – A digital quantum simulator is a universal machine, fully reprogrammable to simulate the thermodynamics or the real-time evolution of any quantum model. This is the kind of simulators envisioned by Feynman and Lloyd. It was proven that, at least for local Hamiltonians, i.e. Hamiltonians containing only finite-range interactions, such a universal quantum simulator can indeed be implemented [19,20]. Such a machine would exploit a fully reconfigurable register of qubits and a programmable sequence of logical gates to realize the desired simulation. This is actually nothing but a quantum computer [22–25]. Hence, the distinction between a digital quantum simulator and a quantum computer mainly lies on the use we make of it. While a “quantum computer” would be used to implement a variety of quantum algorithms, the most celebrated example of which are the Shor factorization algorithm or the Grover search algorithm, a “universal quantum simulator” would be dedicated to optimization problems, such as the determination of the ground state of some Hamiltonian, or to its unitary, real-time, dynamics. In principle, building a universal quantum simulator would thus be as difficult as building a quantum computer. In particular, it would be sensitive to the same decoherence issues and require the implementation of error-correction codes. However, real or imaginary time evolution by a local Hamiltonian usually requires much less resources than generic quantum algorithms, and, in practice, are significantly more robust.

Analog quantum simulators – An alternative approach consists in building up a physical system from scratch to simulate each specific model. Assume one wants to determine the ground state or the time evolution of some Hamiltonian \hat{H} , say a spin-1/2 model. The idea behind analog quantum simulation is to create an ensemble of elements with two well-identified states, e.g., the two polarizations of a photon, the two internal states of an atom, or a quantum dot. These two states are used to represent the two spin states. Then isolate the system from its environment and engineer interactions between these two-state elements according to the Hamiltonian \hat{H} . This may be realized by coupling the system with a cavity in the case of photons or via laser fields in the case of atoms, for instance. In order to find the ground state, cool down the system; in order to determine its time evolution, prepare it in a well-defined initial state and let it run. Then, one realizes from scratch a system exactly governed by the desired model Hamiltonian and Nature simply works for us, with all its quantum properties. The last thing to be done is to measure the outcome.

Analog quantum simulation has pros and cons compared to digital quantum simulation. On the one hand, one needs to build up a new analog simulator for each studied model, while a unique digital simulator would be sufficient. On the other hand, the architecture of the analog simulator can be optimized for the considered problem, while that of a digital simulator is the result of a compromise between all possible cases. In practice, an analog quantum simulator is much easier to build than a digital quantum simulator and there are now many examples of successful implementations of the former, see for instance Ref. [21] and the contributions in this dossier [1–6].

Requirements and challenges

By analogy with standard numerical simulation, one may say that digital quantum simulation assumes that the hardware is available and focuses on the software part. Conversely, analog quantum simulation works directly on the hardware and the software part is built on the latter. In both cases, realizing an efficient quantum simulator requires to take up several major challenges that we summarize here (see also Ref. [9]).

- (i) *Build up.* Create a quantum system that can be manipulated almost at will using external fields. It should be isolated from its environment to avoid decoherence issues. Depending on the problem at hand, the system can be made of bosons, fermions, spins, or mixtures of the latter.
- (ii) *Quantum engineering.* Design the desired Hamiltonian with at least one adjustable relevant parameter. One should be able to tune the latter from a regime where the problem can be solved by other means to a regime where it cannot be solved easily. It allows benchmarking of the quantum simulator, similarly as it is done in traditional numerical work.
- (iii) *Initialization.* Prepare the system in a well-defined state. It allows one to target the ground state using cooling techniques or to prepare some initial state to explore a specific trajectory in the system’s Hilbert space, for instance. The initial state is often a pure state, but one can also prepare a mixed state by interaction with a controlled bath. Furthermore, the bath may be used for simulating open quantum systems.
- (iv) *Detection.* Measure relevant, local or non-local, observables that yield sufficient information to “solve” the problem with sufficient fidelity. Depending on the problem at hand, one may use destructive or non-destructive measurement techniques.

Since the goal is to use quantum simulators to solve problems than cannot be solved by other means, a major concern is of course the reliability of the used simulator. There are several ways to address this issue [26]. First, as mentioned above, one can make sufficient benchmarking of the simulator by addressing regimes where other solutions exists. Second, in the case of isolated systems, one can check that quantum coherence is maintained using an adiabaticity property: one

back-propagates the system and checks the fidelity of the final state to the initial state. Third, it is crucial to solve a given problem on several simulators based on significantly different platforms. Should the results be consistent, one would consider that the solution is reliable. In this respect, dramatic progress has been realized starting by the early 2000s in a variety of fields, including:

- ultracold quantum gases,
- artificial ion crystals,
- photonic systems, including polaritons in cavities,
- superconducting circuits,
- magnetic insulators,
- electronic spins in quantum dots,

for instance. During the past decade, a number of quantum simulators have been demonstrated. So far, the results of most of them could be directly compared to theoretical calculations, which allowed extensive benchmarking. Now, some of the most advanced implementations are likely to address really hard problems, which cannot be solved efficiently using classical algorithms. To make this exciting perspective a reality, continued development of a variety of platforms, including those mentioned above and hopefully new ones, will be pivotal. It will allow us to address complementary questions as well as to compare results obtained by different approaches.

Contributions to this dossier

The dossier on *Quantum simulation* makes a point on recent advances of the field and discusses perspectives via a selection of contributions in various areas from ultracold atoms and quantum optics to statistical physics and condensed matter. Tarruell and myself review progress on the quantum simulation of the celebrated Hubbard model using ultracold Fermi gases. Aidelburger et al. provide an introduction to novel approaches to engineer artificial gauge fields within a wide class of systems ranging from quantum optics to solid-state systems. Lebreuilly and Carusotto discuss realizations of strongly correlated quantum fluids of light in driven-dissipative photonic devices with applications to the generation of Mott insulator and fractional quantum Hall states of light. Le Hur et al. review advances in the study of real-time dynamics of impurity models and their realizations in quantum devices, including superconducting circuits, quantum electrical circuits, and ultracold-atom architectures. Bell et al. propose a novel platform based on superconducting quantum interference devices (SQUIDs) to emulate quantum phase transitions in one dimension, as well as perspectives to address non-integrable and disordered systems. Finally, Alet and Laflorencie discuss recent advances on many-body localization in isolated quantum systems and current experimental efforts to probing this physics.

Acknowledgment

I am grateful to Jean Dalibard and Daniel Estève for suggesting the dossier on *Quantum simulation* and to Christophe Salomon for taking over the editorial process of the contribution I am an author of [1]. I also thank Jean Dalibard for useful comments on this manuscript.

Simulation quantique : des principes de base aux applications

Avant-propos

Imaginée par Richard Feynman au début des années 1980, la simulation quantique a connu un essor considérable grâce au développement de différentes plateformes capables d'émuler une grande variété d'hamiltoniens quantiques. Au cours de la dernière décennie, la plupart des simulateurs quantiques ont implémenté des modèles plutôt bien connus, permettant ainsi une comparaison directe avec des calculs théoriques et une évaluation précise de leur fiabilité. Le domaine a à présent atteint un niveau de maturité tel que l'on peut maintenant aborder des problèmes difficiles que l'on ne sait pas résoudre efficacement à l'aide d'algorithmes classiques. Ces développements ouvrent des opportunités sans précédent pour explorer des champs jusque-là inaccessibles, tester des prédictions théoriques et inspirer de nouvelles approches.

Le présent avant-propos se veut une introduction élémentaire à la simulation quantique. Nous y présentons ses défis, définissons les simulateurs quantiques, à la fois digitaux et analogiques, et énumérons les conditions exigeantes qu'ils requièrent. Nous donnons, de plus, un aperçu des contributions à ce dossier des *Comptes rendus Physique* de l'Académie des Sciences consacré à la *Simulation quantique* [1–6]. Celles-ci complètent d'excellents articles de revue parus précédemment – voir notamment les références [7–14].

Modèles universels et rôle des simulations en physique des problèmes à N corps

Comprendre le comportement des systèmes quantiques macroscopiques est un défi majeur de la physique moderne. Les lois fondamentales de la physique des basses énergies sont à présent bien connues à l'échelle microscopique, disons atomique. Au contraire, de nombreuses questions restent ouvertes, voire même débattues, en qui concerne la dynamique collective à l'échelle macroscopique. Par « échelle macroscopique », nous entendons ici des systèmes faits d'un nombre gigantesque de

constituants ou degrés de liberté, disons 10^6 , 10^{23} , voire plus encore, comme on en rencontre en physique de la matière condensée ou en astrophysique, par exemple. De tels systèmes ne peuvent être traités exactement, que ce soit au niveau classique ou, pis encore, au niveau quantique. C'est cependant le principal enseignement de l'approche thermodynamique que le comportement d'un système macroscopique peut différer radicalement de celui de ses constituants élémentaires. Par exemple, les interactions élémentaires entre les molécules H_2O sont fondamentalement inchangées lorsqu'un récipient d'eau passe de l'état liquide à l'état solide à zéro degré Celsius. De même, les interactions entre les moments magnétiques microscopiques ne présentent aucun changement brutal lorsqu'un matériau magnétique se magnétise en dessous de la température de Curie. Ainsi, les effets spectaculaires observés dans les systèmes macroscopiques sont-ils générés par des instabilités de grande échelle, sans contreparties évidentes au niveau microscopique. Cette observation revêt un caractère universel, résumé dans la maxime *More is Different* [15]. Des phénomènes de ce type, qui sont dits émergents, se produisent aussi dans les systèmes quantiques où de nouveaux effets, impossibles dans le monde classique, apparaissent en dessous d'une certaine température critique ou à température nulle lorsqu'un paramètre d'interaction passe une valeur critique. Des exemples célèbres sont la transition superfluide Λ de l'hélium ou les transitions supraconductrices et d'autres transitions métal-isolant dans certains systèmes électroniques.

De manière assez surprenante au premier abord, alors que les phénomènes émergents n'apparaissent que dans les systèmes macroscopiques de très grande échelle, leurs germes sont contenus dans les interactions mutuelles de leurs constituants élémentaires. Ainsi, des interactions à deux corps suffisent à expliquer une grande quantité de transitions de phase, telles que les transitions liquide-solide et magnétiques mentionnées ci-dessus. L'approche statistique de Boltzmann s'est révélée particulièrement efficace pour décrire ce lien entre les échelles microscopiques et macroscopiques. Afin de comprendre les phénomènes émergents sur des bases aussi fondamentales que possibles, le programme est à présent bien établi : on essaie d'identifier les termes macroscopiques élémentaires qui semblent pertinents et on ignore tous les autres détails microscopiques. On construit ensuite un modèle, aussi générique que possible, susceptible de reproduire les observations expérimentales fondamentales. Les exemples les plus usuels sont les modèles de Ising et de Heisenberg pour les transitions magnétiques et les modèles de Hubbard pour les transitions métal-isolant [16–18]. Il ne reste alors plus qu'à vérifier que le phénomène qui nous intéresse émerge effectivement de la dynamique du modèle simplifié. La mise en oeuvre de ce programme n'est rien d'autre qu'une *simulation*. Elle consiste à construire un modèle simplifié qui mime les propriétés principales d'un système réel.

De la difficulté de simuler des systèmes quantiques génériques à l'aide d'ordinateurs classiques

C'est malheureusement à la dernière étape qu'apparaissent de sévères difficultés, car se limiter à un *modèle simple* ne garantit en rien que la solution soit simple. Dans de rares cas, des solutions exactes sont connues, par exemple pour les systèmes intégrables par ansatz de Bethe. Dans quelques autres cas, il est possible de faire des approximations pertinentes et de construire des théories que l'on peut traiter et qui fournissent des prédictions précises. C'est le cas des approximations de champ moyen, qui fonctionnent bien pour expliquer certaines transitions superfluides, par exemple. Dans la plupart des cas, néanmoins, on ne connaît pas de solutions exactes ou quasi exactes. On a alors recours aux *simulations numériques*. À cet égard, le développement d'approches avancées, telles que les techniques de Monte Carlo, la théorie de la fonctionnelle de densité, la dynamique moléculaire, les approches par réseaux de tenseurs et la théorie de champ moyen dynamique, pour n'en citer que quelques-unes, ont énormément contribué à élargir la classe de modèles dont on connaît la solution. Néanmoins, même les approches numériques les plus avancées ont leurs propres limites et utilisent des approximations ou des représentations qui ne sont pas toujours valables. Il est alors nécessaire de se tourner vers des calculs exacts. Bien que cela soit possible pour des systèmes classiques raisonnablement grands, c'est pratiquement impossible pour un système quantique.

Prenons l'exemple le plus simple, mis en avant par Richard Feynman dans la réf. [19], d'un système constitué de N spins $1/2$. Puisque chaque spin peut être, soit dans l'état spin vers le haut, soit dans l'état spin vers le bas, il y a 2^N configurations possibles. Un état classique pur est paramétré par N nombres binaires dont les valeurs 0 ou 1 représentent l'état de chaque spin. Un ordinateur possédant une mémoire de $100\text{ Go} \sim 10^{12}$ bits peut donc simuler efficacement de l'ordre de 10^{12} spins $1/2$. En revanche, un état quantique générique est la superposition cohérente de toutes les configurations possibles. Ceci requiert 2^N nombres complexes, et la même mémoire de 100 Go ne peut stocker l'état de spin que d'environ $\log(10^{12})/\log(2) \sim 40$ particules. Il est donc impossible de simuler l'état quantique exact de plus de quelques dizaines de spins. Plus généralement, il est impossible, en pratique, de stocker et de manipuler l'état d'un système macroscopique quantique du fait de la croissance exponentielle de son espace de Hilbert en fonction de sa taille physique.

Le lecteur attentif pourra objecter qu'une difficulté similaire se présente si l'on veut simuler la distribution de probabilité complète de la version classique du même système de spins. Dans ce cas, on aurait besoin de stocker les probabilités de chacune des 2^N configurations, dont le nombre croît aussi exponentiellement avec le nombre de constituants. Néanmoins, cette difficulté peut facilement être contournée à l'aide d'un algorithme stochastique consistant à introduire des sauts aléatoires entre les configurations. C'est ce que font notamment les algorithmes de Monte Carlo. Les quantités pertinentes peuvent alors être obtenues en réalisant la simulation un grand, mais pas exponentiellement grand, nombre de fois, et en moyennant les résultats. Comme le fait remarquer Feynman, ceci simule seulement ce que la Nature fait effectivement lorsque nous acquérons des données expérimentales [19].

La difficulté est bien plus sérieuse dans le monde quantique, parce que même les états purs ne peuvent pas être simulés efficacement à des échelles réellement macroscopiques. Feynman fait alors remarquer que la seule chose raisonnable à faire

est de rendre l'ordinateur lui-même quantique. Le registre serait alors naturellement exponentiellement grand en termes de nombre de bits et on serait capable de stocker un nombre exponentiellement grand de coefficients [19]. Feynman a aussi postulé qu'il devrait être possible de simuler l'évolution temporelle d'un système quantique quelconque en un temps de calcul raisonnable. Ce postulat a été prouvé pour des hamiltoniens locaux quelques années plus tard [20]. Seith Lloyd a montré que la simulation peut être effectuée avec une précision arbitraire en un temps de calcul qui croît au plus de façon polynomiale avec le temps physique, en utilisant une décomposition de Trotter–Suzuki de l'opérateur d'évolution en séquences d'évolutions hamiltoniennes élémentaires. Une machine exploitant des ressources quantiques pour simuler un modèle quantique donné est appelée un *simulateur quantique*.

Jusqu'à présent, nous nous sommes concentrés sur le comportement de systèmes à N corps à l'équilibre thermodynamique. Néanmoins, des questions similaires et des défis du même ordre se posent lorsque l'on s'intéresse à l'évolution temporelle unitaire des grands systèmes. Réaliser des simulations quantiques dans ce cadre est, en fait, encore plus urgent, et ce pour plusieurs raisons. D'une part, nous ne connaissons pas (encore) d'approche universelle qui serait à la dynamique hors équilibre ce que la physique statistique est à la thermodynamique. Il s'ensuit que de nombreuses questions restent complètement ouvertes, ayant trait par exemple à la propagation d'information ou la thermalisation de ces systèmes. D'autre part, les systèmes quantiques hors équilibre sont susceptibles de développer une entropie d'intrication qui croît au cours de l'évolution. Il en résulte que les simulations utilisant des machines classiques reçoivent rapidement leurs limites.

Qu'est-ce qu'un simulateur quantique ?

Construire un simulateur quantique reste encore un tour de force. L'objectif ici n'est bien évidemment pas de reproduire exactement le système initial, par exemple un matériau complet avec tous ses détails microscopiques. Ce faisant, on reviendrait au problème initial et on n'apprendrait rien quant à la pertinence du modèle théorique. Dans le meilleur des cas, on se retrouverait à étudier spécifiquement le problème initial et on laisserait de côté les ingrédients physiques fondamentaux à l'origine du phénomène étudié. Le but ici est, au contraire, de construire un système propre, régi exactement par le hamiltonien d'un modèle fondamental. Ce dernier est proposé dans un contexte théorique dans le but de reproduire un certain phénomène physique, observé dans une classe de systèmes réels. C'est en cela que consiste l'idée de base de la simulation quantique.

Plus précisément, un simulateur quantique est un dispositif contrôlé, permettant (i) de construire exactement une classe d'hamiltoniens quantiques, (ii) de contrôler sa dynamique et (iii) d'effectuer des mesures suffisamment précises pour considérer le problème résolu. En pratique, un simulateur quantique est utile à condition qu'il soit capable de résoudre un problème difficile. Dans ce contexte, on considère qu'un problème est « difficile » lorsqu'il ne peut être résolu, ni analytiquement, ni numériquement avec un ordinateur classique en un temps qui croît au plus comme une puissance de la taille du système. Cette propriété est souvent retenue comme le critère principal de la simulation quantique. Néanmoins, elle ne peut pas être considérée comme une définition pérenne, du fait du progrès constant des approches à N corps analytiques et numériques. De fait, il est très difficile de prouver qu'un problème quantique donné ne peut pas être résolu avec un algorithme classique en un temps polynomial. Il est néanmoins communément admis qu'un grand degré d'intrication est un bon critère de travail. Une telle situation apparaît, par exemple, au voisinage des transitions de phase quantiques, dans les systèmes non gappés à l'équilibre ou dans les systèmes hors équilibre, où l'intrication peut croître sans limite au cours de l'évolution temporelle. Les applications de la simulation quantique sont potentiellement illimitées depuis la physique de la matière condensée et des hautes énergies à la chimie, la biologie et la cosmologie par exemple [7,8,21].

Plus précisément, on distingue deux classes de simulateurs quantiques :

Simulateurs quantiques digitaux – Un simulateur quantique digital est une machine universelle, programmable à souhait, permettant de simuler la thermodynamique ou l'évolution temporelle d'un modèle quantique quelconque. C'est le type de simulateurs imaginés par Feynman et Lloyd. Il a été prouvé que, au moins pour des hamiltoniens locaux, c'est-à-dire des hamiltoniens ne contenant que des interactions de courte portée, un tel simulateur quantique universel peut, en effet, être réalisé [19,20]. Une telle machine exploiterait un registre de qubits complètement reconfigurable et une séquence programmable de portes logiques afin de réaliser la simulation désirée. Ceci n'est, en fait, rien d'autre qu'un ordinateur quantique [22–25]. Ainsi, la distinction entre un simulateur quantique digital et un ordinateur quantique repose principalement sur l'usage qu'on en fait. Alors qu'un « ordinateur quantique » serait utilisé pour mettre en œuvre une variété d'algorithmes, dont les exemples les plus célèbres sont l'algorithme de factorisation de Shor et l'algorithme de recherche de Grover, un « simulateur quantique universel » serait dédié à des problèmes d'optimisation, tels que la détermination de l'état fondamental de quelque hamiltonien, ou à sa dynamique temporelle unitaire. En principe, construire un simulateur quantique universel serait donc tout aussi difficile que construire un ordinateur quantique. En particulier, il serait sensible aux mêmes problèmes de décohérence et requerrait l'implémentation de codes correcteurs d'erreurs. Néanmoins, l'évolution en temps réel ou imaginaire par un hamiltonien local requiert en général bien moins de ressources que les algorithmes quantiques génériques et sont, en pratique, significativement plus robustes.

Simulateurs quantiques analogiques – Une approche alternative consiste à construire un système physique *ab initio* pour simuler chaque modèle spécifique. Supposons que l'on souhaite déterminer l'état fondamental ou l'évolution temporelle d'un hamiltonien \hat{H} quelconque, disons un modèle de spins $1/2$. L'idée sous-jacente de la simulation quantique analogique est de créer un ensemble d'éléments à deux états bien identifiés, par exemple les deux polarisations d'un photon, deux

états internes d'un atome ou un point quantique. Ces deux états sont utilisés pour représenter les deux états de spin. On isole alors le système de son environnement et on applique les interactions entre ces éléments à deux états en accord avec l'hamiltonien \hat{H} . Ceci peut être réalisé, par exemple, en couplant le système à une cavité dans le cas de photons ou via des champs lasers dans le cas d'atomes. Pour obtenir l'état fondamental, on refroidit le système ; pour déterminer son évolution temporelle, on le prépare dans un état initial bien défini et on le laisse évoluer. On réalise ainsi, à partir de zéro, un système exactement régi par le hamiltonien désiré, et la Nature travaille simplement pour nous, avec toutes ses propriétés quantiques. Il ne reste alors plus qu'à mesurer le résultat.

Elle présente des avantages et des inconvénients par rapport à la simulation quantique digitale. D'un côté, on doit construire un nouveau simulateur analogique pour chaque modèle étudié, alors qu'un simulateur digital unique serait suffisant. D'un autre côté, l'architecture du simulateur analogique peut être optimisée pour le problème considéré, alors que celle d'un simulateur digital est le produit d'un compromis entre tous les cas possibles. En pratique, un simulateur quantique analogique est bien plus facile à construire qu'un simulateur quantique digital, et il y a à présent de nombreuses réalisations réussies des premiers : voir, par exemple, la références [21] et les contributions incluses dans ce dossier [1-6].

Critères et défis

Par analogie avec la simulation numérique standard, on pourrait dire que la simulation quantique digitale, supposant le matériel disponible, se concentre sur la partie logicielle. À l'inverse, la simulation quantique analogique travaille directement sur le matériel et la partie logicielle en est une partie intégrante. Dans les deux cas, la réalisation d'un simulateur quantique efficace exige de relever plusieurs défis de taille que nous résumons ici (voir aussi la référence [9]).

- (i) *Construction*. Créer un système quantique qui peut être manipulé presque à volonté à l'aide de champs externes. Il doit être isolé de son environnement pour éviter les problèmes de décohérence. Selon le problème étudié, le système peut être fait de bosons, de fermions, de spins ou d'un mélange de ces derniers.
- (ii) *Conception quantique*. Implémenter l'hamiltonien désiré avec au moins un paramètre pertinent contrôlable. On doit être en mesure d'ajuster ce dernier depuis un régime où le problème peut être résolu par d'autres moyens jusqu'à un régime où il ne peut pas être résolu facilement. Cela permet l'étalonnage du simulateur quantique, de la même manière qu'on le fait dans les travaux numériques standard.
- (iii) *Initialisation*. Préparer le système dans un état bien défini. Cela permet, par exemple, de viser l'état fondamental à l'aide de techniques de refroidissement ou de préparer un certain état initial afin d'explorer une trajectoire particulière dans l'espace de Hilbert du système. L'état initial est souvent un état pur, mais on peut aussi préparer un état mélange par interaction avec un bain contrôlé. Par ailleurs, le bain peut être utilisé pour simuler des systèmes quantiques ouverts.
- (iv) *Détection*. Mesurer des observables pertinentes, locales ou non locales, qui apportent suffisamment d'information pour « résoudre » le problème avec une fidélité suffisante. Selon le problème étudié, on peut utiliser des techniques de mesure destructives ou non destructives.

Puisque l'objectif est d'utiliser des simulateurs quantiques pour résoudre des problèmes qui ne peuvent être résolus par d'autres moyens, une préoccupation majeure est bien sûr la fiabilité du simulateur employé. Il existe plusieurs façons d'aborder cette question [26]. Premièrement, comme cela a été mentionné ci-dessus, on peut effectuer un étalonnage suffisant du simulateur en étudiant des régimes où d'autres solutions existent. Deuxièmement, dans le cas de systèmes isolés, on peut vérifier que la cohérence est maintenue en utilisant une propriété d'adiabaticité : on rétro-propage le système et on vérifie la fidélité de l'état final à l'état initial. Troisièmement, il est crucial de résoudre un problème donné sur plusieurs simulateurs reposant sur des plateformes significativement différentes. Si les résultats sont concordants, on peut considérer que la solution est fiable. À cet égard, des progrès spectaculaires ont été réalisés à partir du début des années 2000 dans divers champs, dont

- les gaz d'atomes ultrafroids,
- les cristaux artificiels d'ions,
- les systèmes photoniques, dont les polaritons en cavités,
- les circuits supraconducteurs,
- les isolants magnétiques,
- les spins électroniques dans les points quantiques,

par exemple. Au cours de la dernière décennie, de nombreux simulateurs quantiques ont été mis en œuvre. Jusqu'à présent, les résultats de la plupart d'entre eux ont pu être comparés directement à des calculs théoriques, ce qui a permis un vaste étalonnage. À présent, certaines des implémentations les plus avancées sont capables d'aborder des problèmes réellement complexes, qui ne peuvent être résolus efficacement à l'aide d'algorithmes classiques. Pour faire de cette perspective une réalité, le développement constant d'une variété de plateformes, incluant celles qui sont mentionnées ci-dessus et, espérons-le, de nouvelles, sera déterminant. Cela permettra d'aborder des questions complémentaires et de comparer les résultats obtenus par des approches différentes.

Contributions à ce dossier

Ce dossier sur la *Simulation quantique* fait le point sur les avancées récentes dans le domaine et abordent leurs perspectives par une sélection de contributions couvrant différents domaines, depuis les atomes ultrafroids et l'optique quantique jusqu'à la physique statistique et la matière condensée. Tarruell et moi-même proposons une revue des progrès sur la simulation quantique du célèbre modèle de Hubbard avec des gaz de Fermi ultrafroids. Aidelsburger et al. offrent une introduction à de nouvelles approches pour implémenter des champs de jauge artificiels dans une vaste classe de systèmes, depuis l'optique quantique jusqu'aux systèmes dans l'état solide. Lebreuilly et Carusotto traitent des réalisations de fluides quantiques fortement corrélés de lumière dans les dispositifs photoniques dissipatifs sous alimentation et leurs applications à la génération d'états isolant de Mott et effet Hall fractionnaire de la lumière. Le Hur et al. proposent une revue des avancées dans l'étude de la dynamique temporelle de modèles d'impureté et leurs réalisations dans des dispositifs quantiques, dont les architectures à base de circuits supraconducteurs, de circuits électroniques quantiques et d'atomes ultrafroids. Bell et al. proposent une nouvelle plateforme reposant sur des dispositifs supraconducteurs à interférences quantiques (SQUIDS) pour émuler des transitions de phase quantique en une dimension, ainsi que leurs perspectives pour aborder des systèmes intégrables et désordonnés. Enfin, Alet et Laflorencie décrivent les avancées récentes sur la localisation à N corps dans les systèmes quantiques isolés et les efforts expérimentaux présents pour sonder cette physique.

Remerciements

Je suis reconnaissant envers Jean Dalibard et Daniel Estève pour avoir suggéré la publication de ce dossier consacré la *Simulation quantique* et envers Christophe Salomon pour avoir pris en charge le processus éditorial de la contribution dont je suis l'auteur [1]. Je remercie, de plus, Jean Dalibard pour ses commentaires sur ce manuscrit.

Laurent Sanchez-Palencia

CPHT, École polytechnique, CNRS, Université Paris-Saclay, route de Saclay, 91128 Palaiseau cedex, France
E-mail address: isp@cpht.polytechnique.fr

References

- [1] L. Tarruell, L. Sanchez-Palencia, Quantum simulation of the Hubbard model with ultracold fermions in optical lattices, *C. R. Physique* 19 (2018) 365–393, in this issue.
- [2] M. Aidelsburger, S. Nascimbene, N. Goldman, Artificial gauge fields in materials and engineered systems, *C. R. Physique* 19 (2018) 394–432, in this issue.
- [3] J. Lebreuilly, I. Carusotto, Quantum simulation of zero temperature quantum phases and incompressible states of light via non-Markovian reservoir engineering techniques, *C. R. Physique* 19 (2018) 433–450, in this issue.
- [4] K. Le Hur, et al., Driven dissipative dynamics and topology of quantum impurity systems, *C. R. Physique* 19 (2018) 451–483, in this issue.
- [5] M. Bell, B. Douçot, M. Gershenson, L. Ioffe, A. Petkovic, Josephson ladders as a model system for 1d quantum phase transitions, *C. R. Physique* 19 (2018) 484–497, in this issue.
- [6] F. Alet, N. Laflorencie, Many-body localization: an introduction and selected topics, *C. R. Physique* 19 (2018) 498–525, in this issue.
- [7] I. Buluta, F. Nori, Quantum simulators, *Science* 326 (2009) 108–111.
- [8] I.M. Georgescu, S. Ashhab, F. Nori, Quantum simulation, *Rev. Mod. Phys.* 86 (2014) 153–185.
- [9] J.I. Cirac, P. Zoller, Goals and opportunities in quantum simulation, *Nat. Phys.* 8 (2012) 264–266.
- [10] I. Bloch, J. Dalibard, S. Nascimbène, Quantum simulations with ultracold quantum gases, *Nat. Phys.* 8 (2012) 267–276.
- [11] R. Blatt, C.F. Roos, Quantum simulations with trapped ions, *Nat. Phys.* 8 (2012) 277–284.
- [12] A. Aspuru-Guzik, P. Walther, Photonic quantum simulators, *Nat. Phys.* 8 (2012) 285–291.
- [13] A.A. Houck, H.E. Tureci, J. Koch, On-chip quantum simulation with superconducting circuits, *Nat. Phys.* 8 (2012) 292–299.
- [14] S. Ward, et al., Spin ladders and quantum simulators for Tomonaga–Luttinger liquids, *J. Phys. Condens. Matter* 25 (2013) 014004.
- [15] P.W. Anderson, More is different, *Science* 177 (1972) 393–396.
- [16] G. Mahan, *Many Particle Physics*, Springer, New York, 2000.
- [17] H. Bruus, K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*, Oxford University Press, Oxford, UK, 2004.
- [18] A.M. Tsvelik, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2007.
- [19] R.P. Feynman, Simulating physics with computers, *Int. J. Theor. Phys.* 21 (1982) 467–488.
- [20] S. Lloyd, Universal quantum simulators, *Science* 273 (1996) 1073–1078.
- [21] Nature physics insight on quantum simulation, *Nat. Phys.* 8 (2012) 263–299.
- [22] P. Benioff, The computer as a physical system: a microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing machines, *J. Stat. Phys.* 22 (1980) 563–591.
- [23] D. Deutsch, Quantum theory, the Church–Turing principle and the universal quantum computer, *Proc. R. Soc. A, Math. Phys. Eng. Sci.* 400 (1985) 97–117.
- [24] D.P. DiVincenzo, Quantum computation, *Science* 270 (1995) 255–261.
- [25] D.P. DiVincenzo, The physical implementation of quantum computation, *Fortschr. Phys.* 48 (2000) 771–783.
- [26] P. Hauke, F.M. Cucchietti, L. Tagliacozzo, I. Deutsch, M. Lewenstein, Can one trust quantum simulators? *Rep. Prog. Phys.* 75 (2012) 082401.