

LES EQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES

VERSION COURTE

Etat de l'art et panorama des cas d'usages collaboratifs, des verrous et des pistes d'hybridation. Feuille de route indicative des maturités et conditions de succès à l'aune de l'actualité scientifique.

$$F\left(x_1, x_2, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \dots\right) = 0$$

$$q = -\mu k(\nabla p - \rho g)$$

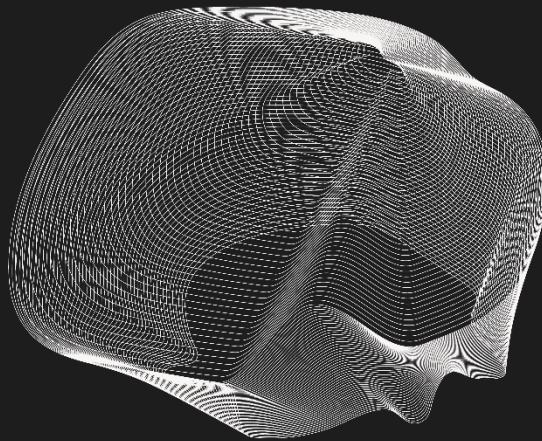
$$\frac{\partial V}{\partial t} + \frac{1}{2}\sigma^2 S^2 \frac{\partial^2 V}{\partial^2 S} + rS \frac{\partial V}{\partial S} - rV = 0$$

$$\frac{d^n y}{dx^n} = f\left(x, y, \frac{dy}{dx}, \dots, \frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}}\right)$$

$$\nabla^2 p = f$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 t} = c^2 \nabla^2 u$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \nabla^2 u$$



$$\begin{aligned}\nabla \times E &= -\frac{\partial B}{\partial t} \\ \nabla \times H &= J + \frac{\partial D}{\partial t} \\ \nabla \cdot D &= \rho \\ \nabla \cdot B &= 0\end{aligned}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \left(u \cdot \nabla\right) u = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 u$$

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \left(u \cdot \nabla\right) u \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 u$$

Synthèse coordonnée et rédigée par Daniel Vert (Systematic)
à partir des contributions des partenaires du Hub Quantique coordonné par le CEA



Contexte :

Le Hub quantique <https://yspot.fr/hub-quantique/> est une initiative collaborative dédiée à la veille, la formation et surtout l'évaluation et l'expérimentation des cas d'usage du calcul quantique à court, moyen et long terme. Il réunit des partenaires industriels coordonnés par le CEA afin d'anticiper et de préparer des entreprises désireuses de se former et d'explorer, pour mieux les anticiper, les applications et impacts du calcul quantique à court, moyen et long terme. Ce livre blanc est une commande des partenaires du Hub quantique désireux d'avoir un éclairage précis sur le sujet des EDPs dans la perspective de disposer d'un état de l'art en rapport avec les futures applications du calcul quantique.

Avis au lecteur :

Ce document constitue une version condensée du livre blanc consacré aux équations aux dérivées partielles (EDP), à leurs verrous computationnels et aux nouvelles approches envisageables pour leur résolution. Il a été conçu pour servir de support de diffusion scientifique dans un contexte de communication, tout en conservant une densité technique suffisante pour rester utile à un lectorat averti. Il s'adresse ainsi à plusieurs niveaux de lecture : ingénieurs, chercheurs, spécialistes du calcul scientifique, experts du quantique, décideurs technologiques, mais aussi lecteurs souhaitant disposer d'une synthèse rigoureuse avant de se reporter au document complet.

L'objectif n'est pas d'appauvrir le raisonnement du livre blanc initial, mais d'en restituer l'ossature de manière continue et cohérente. Le texte reprend les grands axes du document source : fondements mathématiques des EDP, rôle industriel des méthodes de simulation, limites structurelles des approches classiques, potentiel des approches quantiques, apport des réseaux de tenseurs, hybridation avec l'intelligence artificielle, limitations communes des nouvelles méthodes, feuille de route et perspective plus générale sur l'évolution des architectures de calcul scientifique.

Cette version condensée adopte la même position critique que le livre blanc complet. Elle ne traite pas le calcul quantique comme une solution immédiate ni comme une rupture acquise. Elle montre au contraire que l'intérêt du quantique pour les EDP dépend d'hypothèses fortes, de contraintes d'encodage, de conditions sur les opérateurs discrétisés, d'enjeux de lecture de sortie et d'un état matériel encore très éloigné des ambitions de généralisation. Les réseaux de tenseurs et les approches hybrides apparaissent, eux aussi, comme des voies crédibles, mais conditionnées par la structure effective des problèmes considérés. L'enjeu n'est donc pas de remplacer les méthodes classiques, mais d'identifier avec rigueur les contextes dans lesquels de nouvelles briques méthodologiques peuvent créer une valeur réelle.

Cette synthèse retire les développements explicitement centrés sur les cas d'usage détaillés des partenaires du livre blanc initial. Elle conserve toutefois les enseignements transversaux que ces cas permettaient d'illustrer : diversité sectorielle des EDP, importance de la modélisation pour l'industrie, rôle croissant du HPC, nécessité d'approches comparatives entre méthodes classiques et nouvelles approches, et importance d'une structuration collective des efforts de recherche et d'évaluation.

Les lecteurs sont invités à considérer ce livre blanc comme un outil d'exploration et d'aide à la décision. Les résultats et points de vue proposés doivent être interprétés à la lumière des hypothèses, cadres d'étude et maturités technologiques évaluées dans un contexte collaboratif. Certaines sections abordent des pistes de recherche encore en développement ; elles visent à ouvrir la réflexion plutôt qu'à fournir des recommandations opérationnelles immédiates. Dans cette perspective, les analyses proposées doivent être lues non comme des prescriptions définitives, mais comme des repères pour hiérarchiser les priorités de recherche, d'expérimentation et de coopération.

Table des matières

1	Résumé.....	5
2	Introduction.....	7
2.1	Équations aux dérivées partielles et nouveau paradigme de calcul.....	7
2.2	Le Hub Quantique CEA	8
3	Cas d’usage partenaires – synthèse transversale	9
4	Équations aux Dérivées Partielles : fondements et importance industrielle.....	10
5	Typologies des EDP et grands champs d’application	11
5.1	Typologies des EDP.....	11
5.1.1	EDP elliptiques	11
5.1.2	EDP paraboliques	11
5.1.3	EDP hyperboliques	12
5.1.4	EDP dispersives et non linéaires.....	12
5.1.5	Enseignement transversal.....	12
5.2	Approches classiques de résolution des EDP et leurs limites.....	12
6	Pourquoi regarder du côté du quantique ?	14
6.1	Principales familles d’approches quantiques	14
6.1.1	Simulation quantique et Schrödingerisation.....	14
6.1.2	Inversion de matrice : HHL et au-delà.....	15
6.1.3	Encodage des données et des opérateurs.....	16
6.1.4	Conditions aux limites	16
6.1.5	Qumodes et simulation analogique	17
6.1.6	Transformées quantiques	17
6.1.7	Reformulations QUBO et approches variationnelles.....	17
6.1.8	Critères de pertinence d’une approche quantique pour les EDP	18
6.2	Le problème décisif de la sortie.....	18
6.3	État des lieux matériel : NISQ, FTQC, analogique	19
7	Réseaux de tenseurs : une alternative structurée à la haute dimension	20
8	Hybridation : réseaux de tenseurs, IA et quantique	21
9	Perspectives et feuille de route.....	22
9.1	Conclusion générale et horizon scientifique	23
10	Contributeurs et informations complémentaires	24

1 Résumé

Les équations aux dérivées partielles occupent une place centrale dans la modélisation des phénomènes complexes. Elles décrivent des systèmes qui évoluent dans l'espace et dans le temps, qu'il s'agisse de diffusion thermique, d'écoulements fluides, de propagation d'ondes, d'électromagnétisme, de phénomènes quantiques, de transferts dans les matériaux, de dynamique des populations, de climatologie ou de valorisation d'options financières. Elles constituent ainsi un langage transversal de la simulation scientifique et industrielle, capable de relier des domaines très différents par une même grammaire mathématique de l'évolution, de la diffusion, du transport et de l'équilibre.

Dans leur forme générale, les EDP relient une fonction inconnue à ses dérivées partielles :

$$F\left(x_1, x_2, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \dots\right) = 0$$

Cette écriture abstraite recouvre une grande diversité d'équations, depuis les équations elliptiques stationnaires jusqu'aux EDP paraboliques, hyperboliques, dispersives ou non linéaires. En pratique, leur intérêt s'accompagne d'un coût numérique considérable. Dans la quasi-totalité des problèmes réels, il faut discrétiser le domaine spatial et parfois temporel, transformer le problème continu en système de taille finie, puis résoudre ce système à une échelle compatible avec la précision attendue. Lorsque la dimension du problème, la finesse du maillage, la complexité géométrique ou la multiplicité des couplages augmentent, les ressources requises croissent rapidement.

Si l'on discrétise chaque direction spatiale par n points dans un espace de dimension d , le nombre total de degrés de liberté croît comme $N = n^d$.

Cette relation, élémentaire en apparence, concentre l'un des verrous fondamentaux du calcul scientifique : la malédiction de la dimension. Elle explique pourquoi certaines simulations deviennent rapidement hors de portée, même sur des infrastructures HPC puissantes. Les méthodes classiques (différences finies, éléments finis, volumes finis, méthodes spectrales, formulations intégrales, multigrilles, schémas adaptatifs) ont considérablement progressé, mais elles n'effacent pas les contraintes structurelles liées à la dimension, au conditionnement, à la stabilité et aux besoins de mémoire.

Dans ce contexte, trois grandes familles d'approches émergentes retiennent l'attention. La première est celle du **calcul quantique**, qui ouvre des perspectives théoriques importantes pour certaines classes de systèmes linéaires, certaines structures spectrales et certains cadres variationnels issus de la discrétisation des EDP. La deuxième est celle des **réseaux de tenseurs**, qui permettent de compresser certaines représentations de haute dimension lorsque la structure du problème le permet. La troisième est celle des **approches hybrides**, qui combinent modèles physiques, simulation numérique, intelligence artificielle, compression tensorielle et sous-routines quantiques ciblées. Ces approches ne s'excluent pas mutuellement : elles décrivent plutôt un futur possible dans lequel la résolution des EDP reposera sur une orchestration méthodique de plusieurs familles d'outils.

D'un point de vue stratégique, l'enjeu n'est pas seulement de recenser des approches prometteuses, mais de déterminer dans quelles conditions elles peuvent produire un effet utile dans une chaîne de calcul réelle. Cela suppose de raisonner simultanément en termes de structure mathématique du problème, de maturité technologique, de comparabilité avec les meilleurs outils classiques et de valeur opérationnelle des résultats attendus. Le véritable défi n'est donc pas uniquement scientifique ; il réside dans la capacité à sélectionner les bons cas d'usage, à établir des protocoles d'évaluation robustes et à organiser l'intégration progressive de ces nouvelles briques dans des environnements numériques déjà largement structurés par le calcul haute performance.

2 Introduction

2.1 Équations aux dérivées partielles et nouveau paradigme de calcul

Depuis le début des années 2020, l'informatique quantique s'est imposée comme un champ de recherche et d'investissement particulièrement visible. La promesse qui lui est associée est forte : traiter certains problèmes aujourd'hui inaccessibles, ou insuffisamment bien résolus, par les supercalculateurs classiques les plus puissants. Parmi les catégories de problèmes souvent citées figurent la simulation quantique, l'optimisation, certains algorithmes d'apprentissage, et la résolution de systèmes issus d'équations aux dérivées partielles.

Les EDP occupent une place à part dans cette dynamique, car elles sont au cœur de chaînes de calcul critiques dans un grand nombre d'industries. Elles interviennent dans la mécanique des fluides, l'électromagnétisme, la thermique, l'optique, la microélectronique, la science des matériaux, la climatologie, la géophysique, la santé, les biotechnologies et la finance. Elles ne sont pas seulement des objets mathématiques ; elles sont les supports formels de capacités industrielles comme la prédiction, l'optimisation, la réduction de prototypes physiques, l'aide à la décision, la qualification de sûreté et la simulation de scénarios extrêmes.

Cette centralité rend leur coût numérique particulièrement sensible. Même lorsque l'équation semble simple dans sa forme canonique, la résolution effective devient rapidement difficile dès que l'on considère des géométries réalistes, des couplages multiphysiques, des comportements non linéaires, des interfaces mobiles, des fronts, des phénomènes multi-échelles ou des dimensions paramétriques élevées. Les meilleures approches classiques savent déjà traiter une très grande partie de ces problèmes, mais au prix de ressources croissantes, parfois incompatibles avec les contraintes industrielles de temps, de budget ou d'énergie.

Dans ce paysage, le calcul quantique est souvent introduit à travers l'algorithme HHL, qui constitue le cas emblématique d'un avantage de complexité théorique pour l'inversion de certaines matrices creuses et bien conditionnées. L'attrait de cette idée est évident : si des systèmes linéaires issus d'EDP pouvaient être résolus de manière beaucoup plus efficace, alors une large partie du calcul scientifique pourrait être reconfigurée. Mais cette lecture est trompeuse si elle n'est pas accompagnée d'une analyse des hypothèses. L'avantage théorique d'HHL suppose un accès efficace aux données, une préparation d'état réaliste, une structure favorable de l'opérateur, un conditionnement modéré et une capacité à extraire l'information utile depuis l'état quantique sans réintroduire un coût prohibitif. Sans cela, le gain asymptotique ne se traduit pas en avantage pratique.

L'ambition de ce texte est donc double. D'une part, rappeler pourquoi les EDP demeurent un verrou computationnel majeur malgré les progrès du calcul classique. D'autre part, examiner avec rigueur les approches susceptibles de déplacer ce verrou : solveurs quantiques, simulations hamiltoniennes, transformées quantiques, schémas variationnels, approches à variables continues, réseaux de tenseurs et architectures hybrides. Le sujet n'est pas seulement scientifique ; il est aussi méthodologique et stratégique, car il engage des choix de recherche, d'investissement et d'organisation de l'écosystème.

2.2 Le Hub Quantique CEA

Ce document s'inscrit dans les travaux du Hub Quantique¹ du CEA Grenoble Alpes, initiative collaborative dédiée à l'exploration des applications du calcul quantique sur des cas d'usage réels. Le Hub vise à créer les conditions d'un dialogue structuré entre partenaires industriels, acteurs technologiques et experts académiques afin d'évaluer les perspectives offertes par les technologies quantiques.

Il réunit des partenaires industriels leaders dans des domaines très variés : industrie (Air Liquide), pharmacie (Sanofi), défense (DGA), énergie (TotalEnergies), automobile (Ampère-Groupe Renault, Michelin), transports (SNCF), télécoms (Bouygues, TDF), finance (Crédit Agricole) et des fournisseurs de technologies quantiques : Quandela, Alice&Bob, Pasqal, Quobly, Eviden, Exaion.

Dans son parcours ACCESS, le Hub organise la veille tant des annonces marketing que des développements scientifiques récents en matière de technologie et d'algorithmie quantiques, selon les thématiques apportées par les partenaires.

Dans son parcours ADVANCED, le Hub met sur pied des explorations de cas d'usages. Il fournit alors une interface pour la préparation et l'exploitation des problématiques industrielles et ambitionne, pour ses partenaires qui ne disposent pas encore de solution en informatique quantique, de jouer un rôle de premier plan.

En collaboration avec l'écosystème quantique grenoblois et plus largement les spécialistes nationaux et internationaux des thématiques du domaine, le Hub organise des ateliers et des formations allant des algorithmes quantiques (purs ou hybrides) à l'utilisation des machines (analogiques ou numériques).

Il privilégie une approche scientifique rigoureuse et critique afin d'évaluer efficacement les avantages potentiels d'une approche quantique. Pour permettre cette évaluation objective, les partenaires privilégient toujours une comparaison avec les méthodes classiques existantes (réseaux de tenseurs, méthodes Monte Carlo, etc.) en s'appuyant sur les experts de l'écosystème du Hub.

¹ Pour en savoir plus, n'hésitez pas à suivre <https://yspot.fr/hub-quantique/>

3 Cas d'usage partenaires – synthèse transversale

Les cas d'usage portés par les partenaires montrent que les EDP ne constituent pas seulement un cadre théorique général, mais un outil de simulation et de décision déjà central dans des environnements industriels très différents. Ils illustrent à la fois la diversité des phénomènes modélisés, l'intensité des besoins de calcul et l'intérêt potentiel de nouvelles approches lorsque les méthodes classiques atteignent leurs limites.

Crédit Agricole

Dans la finance, les EDP sont mobilisées pour la valorisation de produits dérivés, la modélisation stochastique des marchés, la gestion du risque de crédit et la simulation de scénarios extrêmes. Les enjeux portent sur la robustesse numérique, la prise en compte de dynamiques non linéaires et la capacité à traiter rapidement des modèles de grande dimension soumis à des contraintes réglementaires fortes. Dans ce contexte, les approches quantiques et inspirées du quantique sont envisagées comme des compléments potentiels aux solveurs classiques dans les cas où les calculs intensifs deviennent un goulet d'étranglement.

Sanofi

Dans le secteur pharmaceutique, les EDP interviennent dans la simulation numérique des écoulements au sein des réacteurs de production, qu'il s'agisse de cuves agitées, de mélangeurs statiques ou de séparateurs multiphasiques. Les grandeurs d'intérêt sont les champs de pression, de vitesse, de cisaillement, de turbulence ainsi que les transferts de masse et de quantité de mouvement. Le verrou principal est le coût du couplage pression-vitesse, qui fait de l'équation de Poisson un point critique de la CFD industrielle.

Ampere –Renault Group

Dans l'automobile, les EDP structurent une grande partie de la R&D, en particulier pour l'aérodynamique, la gestion thermique des batteries, le confort acoustique et la fabrication avancée. Le cas étudié par Renault repose sur une modélisation complète du véhicule en géométrie CAO, avec des sorties volumiques, surfaciques et agrégées de très haute dimension. L'enjeu est de trouver un compromis entre fidélité physique, coût de calcul et délai de simulation, dans un cadre où les méthodes DNS, LES, RANS et hybrides n'offrent pas les mêmes niveaux de précision ni les mêmes coûts.

TotalEnergies

Dans l'énergie, les EDP sont mobilisées pour la simulation des écoulements dans les réservoirs poreux, l'optimisation de fermes éoliennes et la modélisation de la propagation des ondes sismiques. Le cas le plus structurant porte sur l'imagerie et l'inversion sismique, où il faut résoudre de très grands problèmes de propagation d'ondes puis ajuster les paramètres géophysiques du sous-sol à partir de données observées. Ces usages combinent simulation directe, problème inverse et optimisation numérique sur des espaces de paramètres de très grande taille.

SNCF

Dans le ferroviaire, les EDP servent à modéliser les vibrations mécaniques et acoustiques, les contraintes sur les infrastructures, les interactions train-voie, ainsi que les comportements thermiques et mécaniques d'organes critiques. Elles jouent un rôle clé pour la maintenance prédictive, l'optimisation du confort passager et la réduction de l'impact environnemental. Ces applications exigent des capacités croissantes de simulation multiphysique et d'optimisation, ce qui en fait un terrain pertinent pour des approches hybrides mêlant HPC, modélisation avancée et, à terme, calcul quantique ciblé.

4 Équations aux Dérivées Partielles : fondements et importance industrielle

Une EDP relie une fonction inconnue de plusieurs variables indépendantes à ses dérivées partielles. Elle formalise l'évolution ou l'équilibre d'une grandeur distribuée dans l'espace et, souvent, dans le temps. Une température, une pression, une densité, une concentration, une amplitude de champ ou une fonction d'onde peuvent toutes être décrites par ce type d'objet mathématique. Les EDP constituent ainsi l'un des cadres les plus généraux de la modélisation continue.

Leur spécificité, par rapport aux équations différentielles ordinaires, est de faire intervenir plusieurs variables indépendantes. Une EDO décrit l'évolution d'une fonction d'une seule variable, typiquement le temps. Une EDP décrit au contraire une dynamique ou une structure dans plusieurs directions à la fois. Cette différence augmente considérablement la richesse des phénomènes modélisés, mais aussi la difficulté d'analyse et de résolution. En dehors de cas idéalisés, la solution analytique explicite n'est généralement pas disponible. Il faut alors recourir à des méthodes numériques, ce qui transforme le problème mathématique en problème computationnel.

Une EDP seule ne suffit pas à définir un problème bien posé. Il faut lui associer des conditions aux limites, et, pour les problèmes dépendant du temps, des conditions initiales. C'est ce cadre complet qui garantit existence, unicité et stabilité de la solution. Les conditions aux limites peuvent imposer une valeur de la solution, un flux, une combinaison linéaire de ces deux quantités, ou encore une relation périodique entre deux bords du domaine. Elles ont un contenu physique clair : température imposée, paroi isolée, excitation électromagnétique, frontière périodique, échange avec un environnement. Elles jouent aussi un rôle numérique déterminant, car elles modifient directement les opérateurs discrétisés, les termes de bord, le conditionnement et la nature des solveurs.

Dans la pratique industrielle, la difficulté du problème tient souvent davantage aux conditions aux limites qu'à l'EDP canonique elle-même. Une équation connue, comme Poisson, la chaleur ou Navier–Stokes, peut devenir extrêmement difficile à résoudre dès que le domaine est irrégulier, que les bords sont complexes, que les coefficients varient fortement, que les interfaces bougent ou que plusieurs physiques sont couplées. Cette observation est essentielle pour toutes les approches émergentes, et particulièrement pour le quantique : ce n'est pas seulement l'équation abstraite qu'il faut traiter, mais le problème complet tel qu'il se présente dans un cas réel.

L'importance industrielle des EDP vient précisément de cette capacité à modéliser des systèmes complexes de manière prédictive. Elles sont au cœur de la conception, de l'optimisation, de la fiabilisation et de l'anticipation. Elles permettent de réduire le nombre d'essais physiques, de tester des situations extrêmes, d'explorer des scénarios de fonctionnement, d'améliorer les rendements énergétiques, d'optimiser des structures et de quantifier des risques. Dans un contexte où la compétition industrielle dépend de plus en plus de la simulation numérique, les EDP ne sont pas un sujet de niche : elles forment une infrastructure intellectuelle et technique majeure.

5 Typologies des EDP et grands champs d'application

5.1 Typologies des EDP

La distinction entre EDP elliptiques, paraboliques, hyperboliques, dispersives ou non linéaires n'est pas uniquement théorique : elle conditionne le comportement des solutions, les contraintes numériques associées et le choix des méthodes de résolution les plus adaptées. Cette typologie constitue donc un repère essentiel pour comprendre les verrous scientifiques, numériques et, à terme, les perspectives offertes par les nouvelles approches de calcul.

5.1.1 EDP elliptiques

Les EDP elliptiques décrivent des phénomènes stationnaires ou des états d'équilibre. Les deux équations les plus emblématiques sont l'équation de Laplace et l'équation de Poisson.

$$[\Delta u = 0 \quad (\text{Équation de Laplace})]$$

$$[\Delta u = f \quad (\text{Équation de Poisson})]$$

L'équation de Laplace correspond à l'absence de source, tandis que Poisson introduit un terme source. Ces problèmes apparaissent dans une très grande variété de contextes : électrostatique, gravitation, conduction thermique stationnaire, potentiels d'écoulement, correction de pression en mécanique des fluides, contraintes mécaniques ou diffusion stationnaire.

Leur importance numérique est considérable. Une large partie des solveurs industriels passent, à un moment ou à un autre, par la résolution de grands systèmes linéaires issus de la discrétisation d'opérateurs elliptiques. Dans les solveurs CFD, par exemple, le couplage pression–vitesse conduit fréquemment à résoudre une équation de Poisson pour la correction de pression. Ce sous-problème constitue souvent l'un des goulets d'étranglement du calcul. Il n'est donc pas surprenant que les approches quantiques aient d'abord attiré l'attention sur ce type de structure.

5.1.2 EDP paraboliques

Les EDP paraboliques modélisent des phénomènes diffusifs évolutifs. L'exemple canonique est l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \nabla^2 u$$

où α est un coefficient de diffusion. Ce cadre s'étend aux phénomènes de diffusion de particules, de transport de concentration, à certains modèles biologiques, et à des équations financières comme l'équation de Black–Scholes :

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \frac{1}{2} \sigma^2 S^2 \frac{\partial^2 V}{\partial S^2} + rS \frac{\partial V}{\partial S} - rV = 0$$

Ces équations décrivent des phénomènes dans lesquels une évolution temporelle est couplée à une diffusion spatiale. Leur difficulté vient de l'articulation entre précision temporelle, stabilité du schéma et résolution spatiale fine.

5.1.3 EDP hyperboliques

Les EDP hyperboliques modélisent la propagation à vitesse finie d'ondes, de signaux ou de perturbations. L'équation d'onde

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 u$$

en est la forme la plus connue. Dans un cadre plus général, les équations de Maxwell et certaines formes des équations de Navier–Stokes compressibles relèvent de cette famille. Elles apparaissent dans l'acoustique, l'imagerie d'ondes, l'électromagnétisme, les télécommunications, l'aérodynamique et la sismique. Leur difficulté numérique provient de la gestion des fronts, des chocs, des discontinuités et du respect de vitesses physiques de propagation.

5.1.4 EDP dispersives et non linéaires

Les EDP dispersives et non linéaires décrivent des régimes où les modes se propagent à des vitesses différentes et interagissent. L'équation de Korteweg–de Vries et l'équation de Schrödinger non linéaire

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla^2 \psi + |\psi|^2 \psi = 0$$

sont deux exemples fondamentaux. La première permet de décrire des ondes en milieu peu profond et l'apparition de solitons ; la seconde intervient en optique non linéaire et dans certains cadres de mécanique quantique effective. Ces équations sont souvent difficiles parce qu'elles combinent dispersion, non-linéarité, sensibilité aux conditions initiales et structures multi-échelles.

5.1.5 Enseignement transversal

La classification des EDP n'est pas purement théorique. Elle renseigne immédiatement sur les verrous de calcul. Les EDP elliptiques mettent en jeu l'inversion de grands systèmes linéaires. Les paraboliques ajoutent des contraintes temporelles et de stabilité. Les hyperboliques exigent une bonne gestion des fronts et des discontinuités. Les dispersives et non linéaires nécessitent des schémas capables de préserver des structures fines, parfois sur de longues échelles temporelles. La nature de l'EDP oriente donc le choix des méthodes et conditionne la pertinence relative des approches classiques, tensorielles, quantiques ou hybrides.

5.2 Approches classiques de résolution des EDP et leurs limites

Les méthodes classiques restent aujourd'hui la colonne vertébrale de la résolution des EDP. Elles se sont diversifiées, raffinées et industrialisées au point de constituer un socle extrêmement robuste. Toutefois, aucune n'est universelle. Chaque méthode correspond à un compromis entre précision, stabilité, coût, souplesse géométrique, nature du problème et niveau de maturité logicielle.

La méthode des différences finies repose sur l'approximation directe des dérivées sur des grilles régulières. Elle est simple à implémenter, efficace sur domaines simples et reste utile pour de nombreux démonstrateurs ou pour certains problèmes structurés. Elle devient toutefois moins pertinente lorsque la géométrie se complexifie, que des interfaces irrégulières apparaissent ou que les conditions aux limites imposent une grande souplesse de maillage.

La méthode des éléments finis part d'une formulation faible du problème et construit la solution comme combinaison de fonctions de base locales sur un maillage. Elle est particulièrement puissante pour les géométries complexes, les problèmes mécaniques et électromagnétiques, et les formulations variationnelles. Elle offre une grande généralité, mais au prix d'une infrastructure plus lourde : génération de maillage, assemblage de matrices, gestion de non-linéarités, choix de préconditionneurs et solveurs adaptés.

La méthode des volumes finis repose sur des principes de conservation locale. Elle est particulièrement adaptée aux équations de transport, à la mécanique des fluides et aux régimes avec fronts ou discontinuités. Sa robustesse conservative constitue un avantage majeur. Son principal coût se manifeste lorsqu'il faut atteindre une précision très fine sur des maillages complexes ou lorsque les schémas de haut ordre deviennent délicats à stabiliser.

À côté de ces grandes familles, les méthodes spectrales et pseudo-spectrales offrent une précision remarquable lorsque les solutions sont régulières et que le domaine possède une structure compatible avec les bases choisies, notamment dans des contextes périodiques ou géométriquement simples. Les formulations intégrales, les fonctions de Green et les algorithmes multipolaires rapides permettent, dans certains problèmes d'ondes, de potentiel ou de domaines non bornés, des réductions de coût spectaculaires. Les méthodes adaptatives et multigrilles, enfin, constituent des avancées majeures pour concentrer l'effort de calcul là où il est nécessaire et accélérer la convergence.

Malgré les progrès réalisés, le verrou fondamental demeure inchangé : le coût de la discrétisation croît très rapidement avec le nombre de degrés de liberté. À mesure que la dimension du problème augmente et que le maillage se raffine, la taille du système à résoudre devient considérable. Le coût global dépend alors fortement de la méthode employée, de la structure de l'opérateur et des propriétés numériques du problème traité. En parallèle, l'amélioration de la précision exige presque toujours un raffinement accru de la discrétisation. Ce gain en exactitude se paie directement par une hausse importante des besoins en mémoire, du temps de calcul et, plus largement, des ressources de simulation mobilisées. Même le HPC, pourtant indispensable, ne supprime pas le plafond structurel. Il le repousse, mais ne l'annule pas. C'est ce constat, plus que l'effet de mode autour du quantique, qui justifie l'exploration d'approches nouvelles.

L'intérêt du calcul quantique n'apparaît alors pas au niveau de l'EDP continue elle-même, mais au niveau des objets numériques issus de sa discrétisation. Dans ce cadre, certaines briques quantiques deviennent théoriquement pertinentes, notamment pour l'inversion de matrices, la simulation d'évolutions dynamiques ou l'estimation de certaines observables. Cette perspective reste toutefois fortement conditionnée par la structure réelle du problème, la qualité des encodages, la nature des conditions aux limites et le coût d'extraction de la sortie utile.

6 Pourquoi regarder du côté du quantique ?

Le potentiel du calcul quantique pour les EDP apparaît essentiellement après discrétisation. Une EDP continue n'est pas directement un objet algorithmique quantique. Elle doit d'abord être transformée en un problème manipulable : système linéaire, problème spectral, évolution semi-discrète, formulation variationnelle ou problème d'optimisation. Ce sont ces objets dérivés que les algorithmes quantiques peuvent viser.

Dans la pratique, cette transformation passe par plusieurs étapes intermédiaires qui structurent ensuite le choix des algorithmes. Une discrétisation spatiale conduit souvent à un système linéaire ou à une équation différentielle ordinaire de grande dimension, tandis qu'une discrétisation complète en espace et en temps mène à une suite d'étapes algébriques successives. Selon la nature de l'EDP, on obtient ainsi soit un problème d'inversion matricielle, soit un opérateur d'évolution, soit un problème spectral ou variationnel. Cette distinction est décisive, car elle conditionne directement la pertinence des familles d'algorithmes quantiques mobilisables : simulation hamiltonienne pour certaines dynamiques, QLSP pour les systèmes linéaires, approches variationnelles pour les reformulations en optimisation, ou encore outils spectraux lorsque la structure propre de l'opérateur joue un rôle central.

Deux grandes situations se distinguent. Les EDP stationnaires conduisent naturellement à des systèmes linéaires du type $Ax = b$.

Les EDP dépendantes du temps conduisent souvent à des systèmes dynamiques ou à des opérateurs d'évolution susceptibles d'être simulés, au moins théoriquement, par des méthodes de simulation hamiltonienne. Cette distinction structure l'ensemble du paysage quantique pour les EDP.

La promesse quantique n'est cependant pertinente que pour certaines structures bien particulières. Les opérateurs doivent être suffisamment creux ou block-encodables, le conditionnement doit rester raisonnable, les données doivent pouvoir être préparées efficacement, et la quantité utile à extraire doit être compatible avec les limitations de la mesure quantique. Autrement dit, le quantique n'est pas une réponse générale aux EDP, mais une famille d'outils potentiellement intéressante pour certains sous-problèmes bien structurés.

6.1 Principales familles d'approches quantiques

6.1.1 Simulation quantique et Schrödingerisation

Une première famille consiste à reformuler certaines EDP linéaires comme des dynamiques de type Schrödinger, afin de pouvoir utiliser les outils standards de la simulation hamiltonienne. On part d'une équation de la forme

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \mathcal{L}u(x, t)$$

et l'on cherche à obtenir, par transformation adéquate, une dynamique unitaire $i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$ où H est un Hamiltonien hermitien. Cette stratégie est souvent appelée

Schrödingerisation. Elle est particulièrement élégante dans les cas où l'opérateur peut être rendu compatible avec une simulation unitaire.

L'intérêt de cette reformulation est de convertir un problème initialement dissipatif ou diffusif en une dynamique unitaire, c'est-à-dire directement compatible avec les primitives naturelles du calcul quantique. Cette possibilité apparaît surtout pour certaines EDP linéaires, homogènes et suffisamment bien structurées, lorsque l'opérateur peut être rendu hermitien ou intégré dans un espace de Hilbert étendu. Dans plusieurs constructions, cela passe par l'introduction d'une variable auxiliaire ou d'une représentation spectrale permettant de recoder l'évolution originale sous une forme exploitable par les algorithmes de simulation quantique. Cette étape est méthodologiquement puissante, mais elle impose des contraintes fortes sur la structure de l'opérateur et sur la façon dont les conditions aux limites sont prises en charge.

Mais cette approche ne vaut pas en général. Dès que l'opérateur présente des composantes dissipatives, non auto-adjointes, ou que les conditions aux limites compliquent fortement sa structure, l'hermiticité devient difficile à préserver. Il faut alors recourir à une hermitianisation explicite, à une augmentation de l'espace d'état ou à l'introduction de variables auxiliaires, ce qui augmente la complexité du problème. La Schrödingerisation est donc une voie méthodologiquement importante, mais limitée à certaines classes d'EDP.

6.1.2 Inversion de matrice : HHL et au-delà

L'algorithme HHL est le symbole le plus connu de l'intérêt du quantique pour les systèmes linéaires. Son objectif est de préparer un état quantique proportionnel à la solution :

$$|x\rangle \propto A^{-1}|b\rangle.$$

Le second membre est encodé sous forme d'état quantique, l'opérateur est traité par estimation de phase et transformation spectrale, puis l'inverse des valeurs propres est appliqué de manière contrôlée. Théoriquement, cette approche peut offrir un avantage asymptotique majeur pour certains systèmes creux et bien conditionnés.

Toutefois, l'intérêt réel d'HHL dépend d'hypothèses exigeantes : accès oracle efficace à la matrice, préparation de l'état $|b\rangle$, simulation hamiltonienne réalisable, conditionnement modéré et coût raisonnable de l'extraction de la quantité utile. Ces hypothèses sont rarement toutes satisfaites dans les systèmes issus d'EDP réalistes. Cela limite fortement la portée pratique du résultat, surtout sur les architectures actuelles.

Entre ces approches théoriques et leur mise en œuvre effective, plusieurs briques algorithmiques intermédiaires jouent un rôle essentiel. L'estimation de phase quantique permet d'accéder à l'information spectrale de l'opérateur, la simulation hamiltonienne sert à implémenter l'évolution associée, et des schémas comme la décomposition de Trotter-Suzuki fournissent des approximations opérationnelles lorsqu'une évolution exacte n'est pas directement accessible. Dans certains contextes, l'évolution en temps imaginaire quantique constitue également une piste intéressante pour approcher des états fondamentaux ou des régimes diffusifs. Ces briques ne résolvent pas à elles seules le problème des EDP, mais elles forment l'infrastructure algorithmique sur laquelle reposent les méthodes plus avancées comme HHL, QSVT ou certaines approches hybrides.

Des approches plus récentes, fondées sur la transformation quantique des valeurs singulières (QSVT) et le traitement du signal quantique (QSP), généralisent la manipulation spectrale des opérateurs. Elles permettent d'approximer l'inverse, des filtres spectraux et d'autres fonctions d'opérateur à condition de disposer d'un block-encoding. Elles offrent un cadre théorique plus puissant que HHL mais restent, elles aussi, dépendantes du coût réel d'encodage.

6.1.3 Encodage des données et des opérateurs

L'encodage constitue l'un des verrous les plus déterminants des approches quantiques pour les EDP. Une amélioration asymptotique du cœur algorithmique n'a de valeur que si l'entrée du problème peut être chargée efficacement dans la machine quantique. Il faut encoder les matrices issues de la discrétisation, les termes sources, les conditions initiales, les données de bord et parfois la structure même du maillage.

L'encodage en amplitudes est souvent évoqué comme la forme la plus expressive, car il permet de représenter un grand nombre de coefficients dans un état quantique de taille logarithmique. Mais cette économie apparente masque un coût potentiel élevé de préparation d'état. Les approches block-encoding, les combinaisons linéaires d'unitaires, les encodages oraculaires et certaines constructions structurées déplacent le problème plus qu'elles ne l'éliminent. Dans bien des cas, la difficulté pratique se situe précisément là.

Le choix du schéma d'encodage dépend étroitement de la nature de l'opérateur obtenu après discrétisation. Lorsqu'une matrice peut être décomposée comme combinaison linéaire d'unitaires, un block-encoding devient envisageable et ouvre l'accès aux outils de type QSVT ou QSP. Lorsqu'elle est hermitienne, il devient possible d'utiliser plus directement des routines de simulation hamiltonienne, fondées sur des schémas comme la Trotterisation, les séries de Taylor tronquées ou des techniques plus avancées de qubitization. Si l'opérateur ne possède pas naturellement cette structure, une hermitianisation reste parfois possible, mais au prix d'un surcoût en ressources et d'une complexité accrue. Ce point est central, car il montre que l'intérêt d'un algorithme quantique dépend moins de sa forme théorique générale que de l'adéquation réelle entre l'opérateur discret et les primitives disponibles.

6.1.4 Conditions aux limites

Le traitement des conditions aux limites est un obstacle algorithmique majeur. En théorie, elles peuvent être absorbées dans la discrétisation et traduites dans la matrice obtenue. En pratique, elles modifient la symétrie, le spectre, la sparsité et parfois l'hermiticité de l'opérateur. Pour des conditions simples, cela reste gérable. Pour des bords complexes, des interfaces, des conditions non homogènes, stochastiques ou dépendantes du temps, le problème devient beaucoup plus difficile.

Lorsque les conditions aux limites sont inhomogènes et dépendantes du temps, une reformulation de type Duhamel permet d'écrire

$$u(t) = e^{At}u_0 + \int_0^t e^{A(t-s)}f(s)ds$$

Cette décomposition sépare l'évolution homogène du forçage. Elle est conceptuellement utile dans un cadre quantique, mais son implémentation reste coûteuse et sensible à la manière dont les termes sont encodés.

Dans les cas les plus simples, les conditions aux limites peuvent être absorbées dans la discrétisation du système et traitées comme des contraintes intégrées à la matrice ou au second membre. Mais cette stratégie devient insuffisante dès que les bords sont complexes, que les conditions sont inhomogènes, dépendantes du temps ou couplées à d'autres phénomènes. Il faut alors recourir à des reformulations plus élaborées : homogénéisation préalable du problème, décomposition de type Duhamel pour séparer l'évolution homogène du forçage, ou encore augmentation de l'espace d'état afin de préserver une structure exploitable. Ces traitements restent coûteux et fragiles, ce qui explique que les conditions aux limites constituent encore l'un des freins majeurs à la généralisation des approches quantiques sur des EDP réalistes.

6.1.5 Qumodes et simulation analogique

Le document source examine également les approches à variables continues, fondées sur des qumodes plutôt que sur des qubits discrets. L'idée est d'exploiter des degrés de liberté continus pour représenter plus naturellement certaines dynamiques continues. Cette voie peut être intéressante pour certaines EDP linéaires ou certaines reformulations analogiques. Elle a aussi l'avantage potentiel de réduire, dans certains cas, le besoin de discrétisation explicite.

Mais cette approche reste fortement contrainte par la programmabilité, la maîtrise physique des Hamiltoniens disponibles, le contrôle des erreurs et la difficulté d'implémenter des conditions aux limites générales. Elle doit être vue comme une piste complémentaire, non comme une solution générique aux EDP industrielles.

6.1.6 Transformées quantiques

La transformée de Fourier quantique (TFQ) joue un rôle important dans certains algorithmes de simulation ou d'inversion lorsque l'opérateur discret possède une structure circulante ou quasi-circulante, typiquement sous conditions aux limites périodiques. Pour un registre de (n) qubits, soit $N = 2^n$, elle s'écrit

$$\text{QFT}(|x\rangle) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i \frac{x}{N} k} |k\rangle$$

Elle permet de diagonaliser efficacement certains opérateurs dans la base de Fourier.

Son intérêt est réel mais très spécialisé. Dès que les conditions aux limites ou la géométrie détruisent la structure circulante, son applicabilité décroît fortement. La TFQ constitue donc une brique de haute efficacité dans certains cas précis, non un mécanisme universel pour les EDP.

6.1.7 Reformulations QUBO et approches variationnelles

Certaines EDP simples, en particulier des problèmes linéaires unidimensionnels avec conditions aux limites simples, peuvent être reformulées comme des problèmes d'optimisation quadratique binaire :

$$E = \min_{b \in \{0,1\}^M} b^T Q b$$

Cette stratégie ouvre la voie à des algorithmes comme QAOA ou à des machines de recuit quantique. Elle est méthodologiquement utile, mais sa scalabilité reste limitée. Dès que la taille du problème ou la finesse de la discrétisation augmentent, la formulation binaire devient coûteuse.

Les algorithmes variationnels quantiques, comme VQLS, cherchent quant à eux à approcher une solution par un état paramétré $|x(\theta)\rangle$ en minimisant une fonction de coût, par exemple

$$C(\theta) = 1 - |\langle b|A|x(\theta)\rangle|^2$$

Ils sont plus compatibles avec les machines NISQ actuelles, car ils réduisent la profondeur des circuits. Mais ils restent sensibles au choix de l'ansatz, au bruit, au paysage d'optimisation et à la taille du problème.

6.1.8 Critères de pertinence d'une approche quantique pour les EDP

La question centrale n'est donc pas de savoir si le calcul quantique pourra, à terme, résoudre des EDP, mais d'identifier à quelles conditions il devient pertinent face à l'état de l'art classique. La sélection des cas d'usage doit reposer sur plusieurs critères simultanés : structure de l'opérateur discrétisé, difficulté du conditionnement, coût d'encodage des données, nature des conditions aux limites, volume d'information qu'il est réellement nécessaire d'extraire, et possibilité d'établir une comparaison rigoureuse avec les meilleurs solveurs disponibles. Sans cette sélection méthodique, le risque est de privilégier des démonstrateurs académiques intéressants mais difficilement transposables dans des contextes industriels réels.

6.2 Le problème décisif de la sortie

L'un des points les plus souvent sous-estimés dans les discours sur l'avantage quantique concerne la sortie du calcul. Une solution d'EDP est généralement un champ, c'est-à-dire un grand ensemble de valeurs distribuées dans l'espace. Or, dans une approche quantique, ce champ est encodé dans les amplitudes d'un état. Le reconstruire intégralement sous forme classique peut demander un nombre de mesures très élevé, au point de dégrader fortement l'intérêt de l'approche.

Cette observation modifie profondément la bonne manière d'évaluer le quantique pour les EDP. L'intérêt le plus crédible n'est pas nécessairement de reconstruire tout le champ plus vite, mais de calculer certaines quantités dérivées : flux, moyennes, moments, normes, observables localisées, métriques de décision ou critères d'optimisation. Lorsque la quantité utile est une fonctionnelle de la solution plutôt que la solution complète, la logique quantique peut devenir beaucoup plus pertinente.

Cette distinction entre restitution complète du champ et estimation ciblée d'observables est déterminante. Elle signifie que l'évaluation d'un solveur quantique ne doit pas être conduite selon les mêmes critères qu'un solveur classique restituant directement toutes les composantes de la solution. Dans de nombreux cas, l'objectif opérationnel n'est pas de reconstruire intégralement le champ, mais d'accéder à certaines grandeurs agrégées, à des indicateurs locaux ou à des quantités utiles à la décision. Cela ouvre la voie à des stratégies de

lecture partielle, compressive ou orientée observables, beaucoup plus compatibles avec les contraintes expérimentales des architectures actuelles.

Il en découle une conséquence stratégique importante : les cas d'usage les plus convaincants pour les approches quantiques ne sont pas nécessairement ceux où l'on veut "tout résoudre", mais ceux où l'on cherche certaines informations ciblées dans des chaînes de calcul complexes. Cette contrainte de sortie conduit à reconsidérer ce qu'est un cas d'usage quantique crédible. Les premiers apports significatifs ne viendront probablement pas d'un remplacement complet des chaînes de simulation classiques, mais d'interventions ciblées sur des sous-tâches à forte valeur ajoutée : estimation rapide de certaines observables, détection de zones critiques, localisation prioritaire d'anomalies, réduction d'un espace de recherche ou focalisation du calcul sur des sous-domaines pertinents. Dans cette logique, la machine quantique n'est pas pensée comme un solveur autonome universel, mais comme un composant spécialisé susceptible d'accélérer certaines étapes bien choisies, avant qu'un raffinement classique ou hybride ne prenne le relais.

6.3 État des lieux matériel : NISQ, FTQC, analogique

Le paysage matériel quantique se répartit aujourd'hui en trois grandes familles. Les machines NISQ sont les seules largement accessibles, mais elles restent limitées par le bruit, les temps de cohérence, la profondeur de circuit disponible et le nombre de qubits réellement exploitables. Elles permettent certains algorithmes variationnels, certaines démonstrations de principe et certaines expérimentations hybrides, mais pas l'exécution robuste à grande échelle des solveurs quantiques les plus ambitieux pour les EDP.

Les architectures tolérantes aux fautes (FTQC) constituent la cible de plus long terme. Ce sont elles qui permettraient, en principe, l'exécution fiable de circuits profonds impliquant estimation de phase, simulation hamiltonienne à grande échelle ou transformations spectrales fines. Mais elles supposent des progrès majeurs en correction d'erreur, compilation, nombres de qubits logiques disponibles et stabilité d'exécution. À ce stade, elles définissent surtout un horizon, non une capacité immédiatement mobilisable.

Les simulateurs analogiques et dispositifs spécialisés constituent une troisième voie. Ils peuvent être pertinents pour certaines dynamiques particulières ou certaines structures continues. Leur programmabilité et leur généralité restent toutefois plus faibles que celles des architectures numériques universelles. Là encore, ils doivent être envisagés comme des outils ciblés.

La conclusion qui se dégage est nette : les approches quantiques sont conceptuellement puissantes mais, pour l'instant, matériellement et méthodologiquement immatures pour la majorité des EDP industrielles complètes. À court et moyen termes, l'hybridation apparaît comme la stratégie la plus réaliste. À plus long terme, des architectures FTQC suffisamment avancées pourraient changer le paysage, mais ce scénario ne doit pas être présupposé comme imminent.

Les horizons de maturité associés à ces approches doivent toutefois être interprétés avec prudence. Ils ne constituent pas des calendriers garantis, mais des fenêtres d'évolution possibles, dépendantes à la fois de progrès scientifiques, de ruptures matérielles, de contraintes physiques fondamentales, mais aussi de facteurs exogènes comme les dynamiques de financement, les arbitrages industriels ou l'environnement réglementaire. Cette incertitude n'interdit pas l'action ; elle impose au contraire de privilégier des stratégies

progressives, comparatives et réversibles, fondées sur des expérimentations pilotes plutôt que sur des hypothèses de déploiement linéaire.

7 Réseaux de tenseurs : une alternative structurée à la haute dimension

Les réseaux de tenseurs occupent une place importante dans le livre blanc parce qu'ils proposent, dès aujourd'hui, une réponse crédible à certains problèmes de grande dimension. Leur idée centrale est de représenter un objet multidimensionnel non pas dans sa forme dense, mais comme une composition structurée de tenseurs de plus petite taille. Cette factorisation exploite la structure interne du problème et peut réduire considérablement les coûts de stockage et de calcul.

Si une fonction ou une solution discrétisée en dimension élevée est représentée naïvement, le coût croît comme n^d . Les réseaux de tenseurs cherchent à remplacer cette explosion par une complexité dépendant d'un rang de coupure r et de la structure effective des corrélations. Dans les cas favorables, cela permet de rendre manipulables des objets qui seraient autrement inaccessibles. Cette logique est particulièrement pertinente lorsque la solution est compressible, que les corrélations effectives sont limitées, ou que l'on peut identifier une structure hiérarchique exploitable.

Les formats tensoriels peuvent être utilisés pour représenter efficacement les solutions, pour construire des approximations variationnelles, pour accélérer certaines opérations linéaires, ou pour réduire la complexité de modèles appris. Ils sont déjà mobilisés dans certains problèmes paramétriques, stochastiques, financiers et en physique numérique. Ils offrent aussi un pont conceptuel intéressant entre calcul classique inspiré du quantique et structures d'intrication faibles.

Plusieurs formats de réseaux de tenseurs peuvent être mobilisés selon la structure du problème. Les représentations de type MPS ou Tensor Train sont particulièrement adaptées aux systèmes unidimensionnels ou aux fonctions de nombreuses variables présentant une structure séquentielle. Les Tree Tensor Networks introduisent une hiérarchie arborescente mieux adaptée aux interactions multi-échelles ou non locales. Les structures de type PEPS permettent, quant à elles, de préserver plus naturellement la géométrie de systèmes bidimensionnels ou tridimensionnels. Selon les cas, ces formats servent soit à représenter directement la solution de manière comprimée, soit à approcher un opérateur, soit encore à construire une approximation variationnelle dans un espace paramétrique de rang contrôlé. Cette diversité est importante, car elle montre que les réseaux de tenseurs ne constituent pas une méthode unique, mais une famille d'architectures de représentation dont la pertinence dépend étroitement de la géométrie, de la dimension et de la structure des corrélations du problème.

Leur limite est cependant claire. Les réseaux de tenseurs ne suppriment pas universellement la malédiction de la dimension ; ils la contournent uniquement lorsque le problème possède effectivement une structure compressible. Dans des géométries complexes, en dimensions modérées mais avec fortes interactions non locales, ou lorsque les rangs requis explosent, l'avantage peut se réduire fortement. Ils doivent donc être intégrés comme une famille d'outils puissante mais conditionnelle.

8 Hybridation : réseaux de tenseurs, IA et quantique

Entre les méthodes purement classiques et les approches quantiques proprement dites, une catégorie intermédiaire mérite une attention particulière : les algorithmes inspirés du quantique. Ces méthodes, exécutées sur architectures classiques, reprennent certains principes issus de la mécanique quantique ou de la simulation quantique, notamment les représentations tensorielles, les logiques variationnelles et certaines structures de compression. Elles offrent un intérêt immédiat, car elles permettent d'explorer dès aujourd'hui des gains potentiels sur des problèmes de grande dimension sans attendre la maturité complète des machines quantiques universelles. Elles jouent ainsi un rôle de passerelle méthodologique entre l'état de l'art classique et les architectures hybrides plus ambitieuses.

Les algorithmes inspirés du quantique peuvent déjà être transposés, partiellement, sur machine classique. Les réseaux de tenseurs offrent une réduction de dimension structurée. L'intelligence artificielle, en particulier les PINNs et les DeepONets, ouvre des voies nouvelles pour approximer des solutions ou apprendre des opérateurs en intégrant directement l'EDP et les conditions aux limites à la fonction d'apprentissage. Les approches de type PINNs cherchent à apprendre une fonction solution en pénalisant non seulement l'erreur de données éventuelles, mais aussi le résidu de l'EDP et le non-respect des conditions aux limites.

Cette logique permet de fusionner connaissances physiques et approximation paramétrique. Les DeepONets, de leur côté, visent à apprendre des opérateurs eux-mêmes, c'est-à-dire des transformations entre espaces de fonctions. Ces méthodes sont prometteuses, mais elles souffrent elles aussi de limitations : difficulté d'entraînement, sensibilité à la paramétrisation, manque de garanties uniformes et dépendance à la qualité des formulations utilisées.

Dans ce cadre, l'hybridation quantique–classique prend tout son sens. Les étapes robustes et bien maîtrisées (discrétisation, assemblage, maillage, pré-conditionnement, post-traitement) restent classiques. Les modules de compression tensorielle et les modèles d'IA peuvent réduire la taille effective du problème, accélérer certaines prédictions ou proposer des initialisations. Les sous-routines quantiques peuvent alors être réservées à des tâches bien ciblées : inversion spectrale partielle, estimation d'observables, optimisation variationnelle, traitement de certains sous-problèmes structurés. Cette répartition fonctionnelle est aujourd'hui beaucoup plus crédible qu'un basculement global vers une résolution entièrement quantique.

9 Perspectives et feuille de route

La trajectoire proposée par le livre blanc repose sur une idée simple : ne pas opposer artificiellement IA, quantique, réseaux de tenseurs et HPC, mais construire un cadre d'évaluation dans lequel leurs complémentarités peuvent être testées de manière ordonnée.

La feuille de route n'a de sens que si elle s'accompagne d'un cadre d'évaluation partagé. La montée en maturité de ces approches suppose la mise en place de benchmarks communs, de protocoles de validation explicites et d'expérimentations pilotes permettant de comparer, sur des bases homogènes, les performances, les coûts, les limites et les conditions d'intégration des méthodes classiques, tensorielles, hybrides et quantiques. Sans ce socle méthodologique, les résultats restent difficiles à interpréter, peu comparables d'un acteur à l'autre et insuffisants pour guider des choix d'investissement ou de coopération. À l'inverse, des pilotes bien cadrés, associés à des métriques transparentes et à des références classiques robustes, peuvent transformer des hypothèses prometteuses en trajectoires crédibles de développement. La feuille de route découle directement de la nature des verrous identifiés dans les chapitres précédents. Ceux-ci ne sont pas uniquement matériels ; ils concernent aussi la formulation des problèmes, la qualité des encodages, la comparaison avec les approches classiques, la capacité à produire des sorties utiles, et l'intégration logicielle dans des chaînes de calcul existantes.

En ce sens, la progression attendue ne dépend pas d'une percée unique, mais d'un ensemble coordonné d'avancées algorithmiques, logicielles, expérimentales et méthodologiques. Cette feuille de route comporte plusieurs dimensions :

- Le premier axe est méthodologique. Il s'agit d'identifier des familles d'EDP pour lesquelles les verrous classiques sont suffisamment nets et les structures suffisamment favorables pour justifier l'exploration d'alternatives. Cela suppose des cas d'étude progressifs, contrôlables, représentatifs et comparables entre plusieurs méthodes. Sans cadre commun d'évaluation, la comparaison reste biaisée ou anecdotique.
- Le deuxième axe est logiciel. Il faut développer des bibliothèques, frameworks et interfaces permettant de connecter solveurs EDP, backends quantiques, modules d'IA, représentations tensorielles et outils de benchmarking. Le défi n'est pas seulement algorithmique ; il est aussi d'ingénierie logicielle. Une nouvelle méthode non intégrable dans des chaînes de calcul existantes aura du mal à produire un impact réel.
- Le troisième axe est matériel. Il ne s'agit pas de dépendre d'une feuille de route unique, mais de suivre les progrès des différentes familles de plateformes : NISQ, dispositifs analogiques spécialisés, et plus tard FTQC. Les démonstrateurs utiles viendront probablement de plusieurs lignes technologiques en parallèle. Mais ils devront toujours être reliés à des cas d'usage définis et à des comparaisons classiques sérieuses.
- Le quatrième axe est collectif. Le document insiste fortement sur la nécessité d'un écosystème associant industriels, chercheurs, spécialistes du calcul scientifique, acteurs du quantique, développeurs logiciels et utilisateurs finaux. L'évaluation des nouvelles méthodes pour les EDP ne peut pas reposer sur des acteurs isolés. Elle exige au contraire une dynamique de co-construction, de partage de benchmarks, de

confrontation entre besoins réels et promesses techniques, et de maturation progressive.

Aucune avancée durable sur ces sujets ne pourra reposer sur des initiatives isolées. La résolution des EDP par des approches nouvelles exige un écosystème articulant besoins industriels, modélisation mathématique, algorithmique, ingénierie logicielle, accès aux plateformes de calcul et capacité de comparaison avec l'état de l'art. La structuration de cet écosystème n'est pas un enjeu secondaire : elle conditionne la possibilité de mutualiser les benchmarks, de partager les retours d'expérience, d'éviter les effets d'annonce et de faire émerger des trajectoires d'adoption fondées sur des preuves plutôt que sur des anticipations spéculatives.

9.1 Conclusion générale et horizon scientifique

Le message central peut être formulé sans ambiguïté. Les EDP resteront l'un des grands défis du calcul scientifique moderne parce qu'elles concentrent simultanément exigence de fidélité physique et explosion de complexité computationnelle. Les méthodes classiques demeurent puissantes, indispensables et continuellement améliorées. Elles resteront longtemps la base opérationnelle de la simulation scientifique. Mais elles se heurtent à des plafonds, en particulier lorsque les problèmes combinent haute dimension, raffinement, non-linéarité, multiphysique, incertitude et contraintes de temps de calcul.

Face à cela, le calcul quantique n'est ni un mirage sans valeur ni une solution immédiatement disponible. Il constitue une piste sérieuse, mais fortement conditionnée. Son intérêt réel dépendra de l'identification de sous-problèmes adaptés, de progrès matériels substantiels, d'une gestion réaliste des entrées et des sorties, et d'une insertion pragmatique dans des chaînes hybrides. Les réseaux de tenseurs proposent déjà, aujourd'hui, des réponses solides pour certaines structures de haute dimension. L'intelligence artificielle ouvre des voies nouvelles pour l'approximation, la réduction et l'apprentissage d'opérateurs. Ensemble, ces approches dessinent moins une rupture unique qu'un paysage de complémentarités possibles.

Cette situation conduit à privilégier une stratégie d'exploration large plutôt qu'une focalisation exclusive sur l'hypothèse d'un avantage quantique immédiat. Les progrès potentiellement décisifs peuvent aussi émerger d'avancées incrémentales mais robustes dans les réseaux de tenseurs, les approches hybrides, l'apprentissage physique ou les convergences avec le HPC. Maintenir cette diversité méthodologique constitue une manière de réduire le risque technologique, d'éviter une dépendance excessive à une seule trajectoire de rupture et d'augmenter la probabilité d'identifier, à court ou moyen terme, des gains concrets là où ils sont effectivement accessibles. La leçon stratégique est claire. Il faut raisonner en termes d'écosystème, de benchmarks, de cas d'usage bien choisis, d'hybridation et de comparaison honnête avec l'état de l'art classique. Le progrès viendra vraisemblablement moins d'annonces spectaculaires que d'une accumulation de démonstrations solides, de cadres d'évaluation communs, d'outils interopérables et d'un dialogue continu entre modélisation, algorithmique et architecture matérielle. Dans cette perspective, l'exploration des nouvelles approches pour les EDP n'est pas seulement un sujet technologique. C'est un enjeu méthodologique, scientifique et industriel de premier ordre.

10 Contributeurs et informations complémentaires

Nous tenons à remercier l'ensemble des personnes qui ont contribué à l'élaboration de ce livre blanc, par leurs échanges, leurs retours d'expérience, la définition des cas d'usage et leurs relectures attentives.

Nos remerciements vont aux contributeurs :

Pour le CEA

Stéphane Louise, Robin Ollive, Christophe Vautey, Francesco Binanti

Pour le groupe Crédit Agricole / Crédit Agricole CIB :

Maxime Hardy, Christophe Michel, Andrea Le Vot.

Pour Bull :

Robert Wang, Olivier Hess.

Pour Ampère –Renault Group :

Thomas Chapuis, Nassima Benammar, Guillaume Brenaut.

Pour Sanofi :

Régis Andreux, Jean-Philippe Rameau, Didier Caudron, Nicolas Muzet, Etienne Guillot.

Pour TotalEnergies :

Jean-Patrick Mascomere, Jérémie Messud, Henri Calandra.

Leurs contributions ont été déterminantes pour ancrer ce document dans des cas d'usage concrets, représenter fidèlement les besoins industriels et préciser les enjeux scientifiques et technologiques liés aux équations aux dérivées partielles et aux approches hybrides de calcul.

Nos remerciements vont également au comité de relecture constitué de

Mohammed Bediche – CS Group – Sopra Steria

Brice Chichereau – CEA

CEA
Direction de la Recherche et de la Technologie
Direction Innovation
Y.SPOT
17, avenue des Martyrs
38000 Grenoble
<https://yspot.fr/hub-quantique/>

Auteurs :

Christophe VAUTEY – Responsable du Hub Quantique (2024-mars 2025)
Mail : christophe.vautey@gmail.com

Daniel VERT – Responsable cas d’usages Systematic
Mail : daniel.vert@systematic-paris-region.org

Contacts et informations complémentaires :

Pour plus d’informations sur le Hub Quantique : conditions de participation, ressources à disposition, gouvernance et fonctionnement, projets et événements..., vous pouvez contacter la coordinatrice du Hub, Tiana Delhome : tiana.delhome@cea.fr ou le responsable scientifique du Hub, Francesco Binanti : francesco.binanti@cea.fr.