

LES EQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES

VERSION LONGUE

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.

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

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

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

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

$$\nabla^2 p = f$$

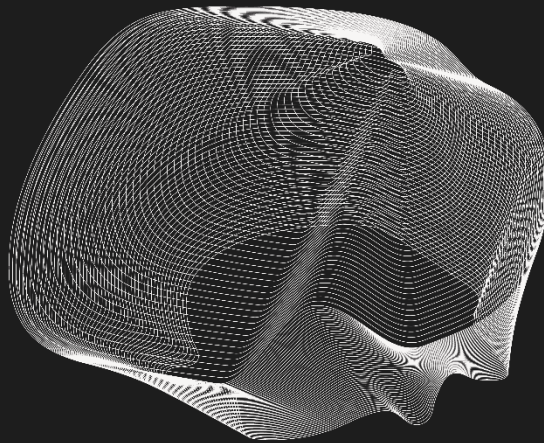
$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 u$$

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

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

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

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



Coordonné par le CEA, le Hub quantique rassemble, depuis 2024, des fournisseurs de technologies et des utilisateurs afin d'explorer les potentiels applicatifs du calcul quantique.



Avis au lecteur :

Ce livre blanc s'inscrit dans les travaux des partenaires du Hub Quantique du CEA désireux d'avoir un éclairage précis sur le sujet des EDP dans la perspective de disposer d'un état de l'art en rapport avec les futures applications du calcul quantique.

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'accompagner les entreprises dans l'exploration, l'évaluation et l'anticipation des impacts du calcul quantique à court, moyen et long terme.

Ce livre blanc a été conçu comme un document destiné à offrir une vision structurée, rigoureuse et critique des méthodes classiques et émergentes appliquées aux équations aux dérivées partielles (EDP). Il rassemble des contributions issues d'experts industriels et technologiques, ainsi que de spécialistes du calcul scientifique, afin d'éclairer les enjeux techniques, méthodologiques et stratégiques liés à la résolution des EDP dans des contextes applicatifs réels.

L'objectif de ce document n'est pas de proposer une solution unique ou définitive, mais de mettre en perspective les approches existantes, leurs contraintes et leurs limites, ainsi que les perspectives ouvertes par des méthodes nouvelles, en particulier les approches hybrides combinant calcul haute performance, quantique et modèles numériques avancés. Les analyses présentées reflètent l'état de l'art au moment de la rédaction et pourront évoluer rapidement dans un contexte scientifique et technologique en transformation.

Ce livre blanc comporte plusieurs sections à forte densité technique, notamment celles consacrées :

- à la classification mathématique des EDP et à leurs implications numériques,
- aux méthodes classiques de discrétisation et à leurs limites structurelles,
- aux approches quantiques ou hybrides pour la résolution de systèmes issus de la discrétisation d'EDP,
- aux réseaux de tenseurs et autres méthodes émergentes de réduction de dimension ou d'approximation variationnelle.

Ces développements s'adressent en priorité aux ingénieurs, chercheurs et praticiens du calcul scientifique souhaitant approfondir la compréhension des verrous computationnels et des voies de recherche actuelles.

Certaines parties du document visent explicitement à accompagner la prise de décision dans les organisations confrontées à des besoins croissants en simulation, optimisation ou modélisation. Les analyses sectorielles, les retours des partenaires et la feuille de route proposée ont pour objectif de :

- situer les ruptures technologiques en cours
- identifier les domaines où un changement d'échelle est attendu

ORIENTER LES INVESTISSEMENTS VERS LES APPROCHES LES PLUS PROMETTEUSES

Encourager la construction d'un écosystème collaboratif autour des EDP.

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.

Remerciements :

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 Crédit Agricole / Crédit Agricole CIB :

Maxime Hardy, Christophe Michel, Andrea Le Vot.

Pour Bull :

Robert Wang, Olivier Hess.

Pour Ampere – Groupe Renault :

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

TABLE DES MATIERES

1. Résumé.....	9
2. Introduction.....	10
2.1 Promesses & Perspectives du calcul quantique pour les EDP	10
2.2 Objectifs du document	11
2.3 Guide de lecture	11
2.4 Le Hub Quantique CEA	12
3. Équations aux Dérivées Partielles : fondements et importance industrielle.....	14
3.1 Définition des EDP dans la modélisation des phénomènes physiques et processus industriels	14
3.2 Différence entre équations aux dérivées ordinaires (EDO) et EDP	14
3.3 Rôle des conditions aux limites dans la résolution des EDP	15
3.3.1 Définition et typologie des conditions aux limites	15
3.3.2 Importance physique et interprétation	15
3.3.3 Influence sur la discrétisation et les solveurs numériques	16
3.3.4 Conséquences pour les approches quantiques.....	16
3.4 Pourquoi les EDP sont un enjeu industriel majeur ?	16
3.4.1 Applications dans les sciences fondamentales (physique, chimie, biologie).....	17
3.4.2 Applications dans l'ingénierie et l'industrie (fluides, matériaux, climatologie, énergie, finance).....	17
3.5 Besoins croissants en puissance de calcul et limitations des approches actuelles	18
4. Typologies des EDP et cas d'usage associés	20
4.1 EDP elliptiques (ex. ELECTROSTATIQUE, CONDUCTION, MATERIAUX).....	20
4.1.1 Secteurs d'applications	20
4.1.2 Secteurs d'applications industrielles	21
4.2 EDP paraboliques (ex. Équation de la chaleur, diffusion).....	22
4.2.1 Secteurs d'applications industrielles	23
4.3 EDP hyperboliques (ex. Propagation d'ondes, électromagnétisme et fluides compressibles)	26
4.3.1 Secteurs d'applications industrielles	27
4.4 EDP dispersives et non linéaires (ex. Korteweg–de Vries, Schrödinger)	30
4.4.1 Modélisation mathématique des EDP dispersives et non linéaires.....	30
4.4.2 Secteurs d'applications industrielles	31
4.5 Synthèse transversale des défis et perspectives	33
4.5.1 Les EDP paraboliques	33
4.5.2 Les EDP elliptiques	33
4.5.3 Les EDP hyperboliques	33
4.5.4 Les EDP dispersives	34
4.5.5 En résumé	34
5. Approches classiques de résolution des EDP et leurs limites	36
5.1 Méthodes numériques de résolution des EDP et leurs limites	36
5.1.1 Méthode des différences finies (FDM)	36
5.1.2 Méthode des éléments finis (FEM).....	37
5.1.3 Méthode des volumes finis (FVM).....	38
5.1.4 Perspectives et limites globales	39
5.2 Méthodes spectrales et pseudo-spectrales.....	39
5.3 Méthodes intégrales et techniques de Green	40
5.3.1 Principes des méthodes intégrales.....	40
5.3.2 Domaines d'application privilégiés	40
5.3.3 Algorithmes multipolaires rapides (FMM)	41
5.3.4 Défis numériques et extension	41
5.4 Méthodes avancées : adaptatives, hybrides et multigrilles	41
5.4.1 Méthodes adaptatives (AMR – Adaptive Mesh Refinement).....	42
5.4.2 Méthodes multigrilles	42
5.4.3 Méthodes hybrides.....	42
5.5 Ouverture : Vers l'intégration dans les architectures HPC	43
5.5.1 L'enjeu du calcul haute performance (HPC)	43
5.5.2 Pourquoi ne pas résoudre les EDP analytiquement ?.....	43

5.5.3	Comparaison des méthodes numériques	44
5.6	Guide de choix des méthodes selon la nature de l'EDP	45
5.6.1	Exemples de contraintes de stabilité.....	47
5.6.2	Complexité et limitations	47
5.6.3	Bilan des limites : temps de calcul, précision, complexité dimensionnelle.....	48
5.6.4	Limitations des méthodes classiques & développement d'approches disruptives.....	49
6.	Positionnement sur les EDP	51
6.1	Vision par domaine d'application	51
6.1.1	Finance.....	51
6.1.2	Énergie	53
6.1.3	Automobile.....	53
6.1.4	Pharmaceutique.....	54
6.1.5	Transport ferroviaire	54
6.1.6	Numérique et cybersécurité	55
6.2	Cas d'usage des partenaires	56
6.2.1	Crédit Agricole.....	56
6.2.2	Sanofi	56
6.2.3	Renault.....	57
6.2.4	TotalEnergies	57
6.2.5	SNCF.....	58
7.	Approches quantiques pour les EDP	59
7.1	Le potentiel d'une approche quantique pour les EDP :.....	59
7.1.1	EDP dépendantes du temps : vers des solveurs quantiques dynamiques	59
7.1.2	EDP stationnaires : système linéaire et solveurs quantiques	59
7.1.3	Enjeux pratiques et adaptation aux architectures	60
7.2	Principes de base des algorithmes quantiques pour les EDP	60
7.3	Méthodes basées sur la simulation quantique et les transformées quantiques.....	62
7.4	Méthodes basées sur l'inversion de matrice	64
7.5	Implémentation sur ordinateurs quantiques	66
7.5.1	Décomposition de Trotter-Suzuki.....	67
7.5.2	Estimation de phase quantique (Quantum Phase Estimation - QPE).....	68
7.5.3	Difficultés d'implémentation et lien avec la Trotterisation.....	69
7.5.4	Évolution en temps imaginaire quantique (Quantum Imaginary Time Evolution - QITE)	70
7.5.5	Transformation quantique des valeurs singulières (QSVT) – incluant le traitement du signal quantique (QSP).....	70
7.6	Encodage des données et des opérateurs	71
7.7	Gestion des conditions aux limites	73
7.8	Simulation analogique et qumodes	75
7.9	Transformées quantiques pour les EDP.....	76
7.10	Transformation d'une EDP en problème d'optimisation de type QUBO	77
7.11	Variational Quantum Algorithms.....	80
7.12	Implémentation sur ordinateurs quantiques : état des lieux, possibilités et limites	82
7.12.1	Possibilités actuelles	82
7.12.2	Limites et verrous technologiques.....	83
7.12.3	Vers des implémentations futures	84
7.13	Les différents types de machines	85
7.13.1	NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum).....	85
7.13.2	FTQC (Fault-Tolerant Quantum Computing).....	86
7.13.3	Analogique (quantum simulators)	87
7.13.4	Avantage FTQC/LSQ et NISQ.....	88
7.14	Méthodes hybrides quantique-classique	89
7.14.1	Cas où le quantique apporte un avantage réel.....	92
7.14.2	Difficultés d'implémentation sur des machines actuelles	93
7.15	Problème de l'output d'un calcul quantique sur une EDP.....	94
7.16	Limitations et défis actuels des approches quantiques.....	96
7.17	Résolution d'EDP par voie quantique : Conclusion.....	97
8.	Le potentiel des réseaux de tenseurs pour les EDP	98

8.1	Réseaux de Tenseurs	98
8.1.1	Définition d'un tenseur	98
8.1.2	Utilisation de réseaux de tenseurs pour la résolution d'EDP en grande dimension	99
8.1.3	Représentation et réduction de la complexité	100
8.1.4	Résolution directe et approximation variationnelle	101
8.1.5	Applications industrielles et cas concrets	101
8.1.6	Limites et perspectives	102
9.	Approches hybrides - couplage de réseaux de tenseurs, Quantique & IA.....	103
9.1	Algorithmes inspirés du quantique pour la résolution des EDP	103
9.2	Intelligence artificielle pour les EDP	105
9.3	Synergie entre réseaux de tenseurs et calcul quantique.....	106
9.3.1	Exemples d'applications réussies	106
9.3.2	Défis d'une approche combinée réseau de tenseurs & quantique	107
10.	Limitations et défis communs des nouvelles méthodes	108
10.1	Scalabilité et généralisation	109
11.	Perspectives et Feuille de Route	112
11.1	Approches mixtes : combinaison de l'IA, du quantique et des réseaux de tenseurs	112
11.2	Intégration des Solveurs Quantiques avec les Réseaux Neuronaux et Tensoriels	112
11.3	Combinaison IA et Quantique : vers des Algorithmes Hybrides	113
11.4	Vers des Plateformes de Calcul Hybrides	113
11.5	Feuille de route.....	114
11.5.1	Impact global des nouvelles approches sur les sciences et l'industrie	114
11.5.2	Appel à contributions pour un écosystème collaboratif autour des EDP	115
12.	Horizon	117
12.1	Défis et perspectives pour la résolution quantique des EDP.....	117
12.1.1	Défis technologiques des architectures quantiques.....	117
12.1.2	Objectifs algorithmiques et logiciels	118
12.1.3	Convergence HPC-quantique.....	119
12.1.4	Tableau Récapitulatif.....	119
12.1.5	Verrous majeurs à lever	120
12.1.6	Synthèse.....	120
12.2	Vision sectorielle.....	121
12.2.1	Secteur de l'Énergie (Optimisation, simulations environnementales)	121
12.2.2	Secteur de l'Aéronautique (Optimisation des flux aérodynamiques, conception des matériaux)	122
12.2.3	Secteur de la Finance (Valorisation d'options, gestion de risques).....	122
12.2.4	Secteur de la Santé (Modélisation des tissus biologiques, génétique).....	123
12.2.5	Tableau Récapitulatif.....	124
13.	Conclusions	126
13.1	Exploration des nouvelles méthodes et leur potentiel transformateur	126
13.2	NISQ et FTQC : État de la recherche et limites actuelles	126
13.3	L'importance d'une approche hybride : IA, quantique et réseaux de tenseurs	126
13.4	La nécessité d'un écosystème collaboratif	127
13.5	L'importance d'une exploration large de l'ordinateur quantique	127
13.6	Réflexion sur les méthodologies de machine learning pour résoudre des EDP	127
13.7	Le besoin de penser différemment pour de nouvelles approches	128
13.8	Impact global des nouvelles approches sur les sciences et l'industrie.....	128
13.8.1	Révolution dans la simulation des matériaux et de la chimie quantique.....	128
13.8.2	Implications pour la santé et les sciences de la vie	128
13.8.3	Défis et perspectives pour l'industrie	128
14.	Annexes	129
14.1	Glossaire	129
14.2	Liste des figures	129
14.3	Liste des tableaux	130
14.4	Exploration de nouvelles approches : du quantique aux réseaux de tenseurs	130
14.4.1	Vers une hybridation quantique ?.....	130

14.5	Exemple chiffré : résolution de l'équation de Poisson 1D par l'algorithme de HHL.....	132
14.6	Réseau de tenseurs – Précisions.....	133
14.6.1	<i>Quelques usages des réseaux de tenseurs</i>	136
14.7	Cas d'usages spécifiques des partenaires.....	Erreur ! Signet non défini.
14.7.1	<i>Crédit Agricole</i>	Erreur ! Signet non défini.
14.7.2	<i>Renault</i>	Erreur ! Signet non défini.
14.7.3	<i>Sanofi</i>	Erreur ! Signet non défini.
14.7.4	<i>TotalEnergies</i>	Erreur ! Signet non défini.
14.7.5	<i>SNCF</i>	Erreur ! Signet non défini.
14.8	Contributeurs.....	138

1. RESUME

Les Équations aux Dérivées Partielles (EDP) jouent un rôle central dans la modélisation des systèmes complexes en physique, ingénierie, finance et climat. Leur résolution représente un défi majeur à l'ère du calcul intensif, confrontée aux limites des méthodes numériques classiques face à la croissance exponentielle des besoins en ressources, notamment dans les régimes de haute dimension.

Ce livre blanc propose un état des lieux critique des approches traditionnelles (différences finies, éléments finis, volumes finis), analyse leurs limitations intrinsèques liées à la complexité $\mathcal{O}(n^d)$ et explore les voies émergentes permettant de franchir ce plafond computationnel. Parmi elles, les réseaux de tenseurs, l'intelligence artificielle et l'informatique quantique ouvrent de nouvelles perspectives en matière d'approximation, de réduction de dimension et de simulation hybride.

Ces méthodes, bien que prometteuses, restent à des niveaux de maturité technologique variés et requièrent une mobilisation collective pour identifier les cas d'usage pertinents, évaluer leur efficacité et consolider un cadre méthodologique commun. Ce document, issu d'une collaboration entre chercheurs, industriels et experts du calcul scientifique, vise à structurer cette dynamique en fournissant des repères techniques et stratégiques. Il entend faciliter les prises de décision et orienter l'adoption progressive de ces approches innovantes dans la résolution des EDP.

2. INTRODUCTION

2.1 PROMESSES & PERSPECTIVES DU CALCUL QUANTIQUE POUR LES EDP

Depuis le début des années 2020, les technologies de calcul quantique connaissent un développement rapide et attirent l'attention croissante de l'ensemble des acteurs de la société. Cette dynamique repose sur **une promesse forte** : celle de **pouvoir résoudre des problèmes aujourd'hui inaccessibles**, même pour les superordinateurs les plus puissants.

Parmi ces problèmes dits « intractables », **la résolution des équations aux dérivées partielles (EDP) occupe une place centrale**. Ces équations sont essentielles pour modéliser une grande diversité de phénomènes physiques, chimiques ou économiques. Elles interviennent dans des domaines aussi variés que la finance, la chimie quantique, la mécanique des solides et des fluides, ou encore les systèmes à N corps.

Bien que certaines EDP puissent s'écrire de manière mathématiquement simple, **leur résolution numérique peut nécessiter des ressources de calcul ou de mémoire considérables**, au point de rendre inaccessibles des solutions exactes ou même approchées dans des cas complexes. Les méthodes numériques classiques reposent sur la discrétisation de l'espace et du temps, ce qui engendre une explosion exponentielle du nombre de degrés de liberté avec l'augmentation de la précision ou du nombre de dimensions. C'est ce que l'on appelle « **la malédiction de la dimension** »¹. Ainsi, la résolution de systèmes de grande taille, tels que ceux issus de la mécanique des fluides turbulents (équations de Navier-Stokes en 3D) ou des modèles de pricing stochastiques en finance, devient rapidement inabordable en temps de calcul ou en mémoire.

Les supercalculateurs actuels (HPC), bien qu'extrêmement puissants, ne permettent pas toujours de surmonter ces limitations. En outre, les méthodes traditionnelles peinent à traiter certains comportements physiques complexes, comme les interfaces mobiles, les fronts de choc, les régimes fortement non linéaires ou encore les couplages multi-échelles, où la stabilité numérique devient un défi.

Dans ce contexte, le calcul quantique suscite un intérêt croissant, notamment en raison de la perspective d'offrir des accélérations asymptotiques significatives dans la résolution de problèmes issus de la physique computationnelle. Un exemple emblématique est l'algorithme **HHL** (Harrow, Hassidim, Lloyd), souvent présenté comme un résultat théorique emblématique sous des hypothèses fortes d'accélération asymptotique pour certaines classes de systèmes linéaires

Cette accélération est définie **par rapport à la taille N du système**, avec une complexité en $\mathcal{O}(\kappa^2 \log N)$ contre $\mathcal{O}(N^k)$ pour les meilleurs algorithmes classiques. Toutefois, cette performance repose sur des hypothèses très fortes : existence d'un accès oracle de la matrice, possibilité de préparer efficacement l'état, conditionnement modéré, et capacité à extraire l'information pertinente à partir de l'état quantique. En l'absence d'architectures quantiques pleinement tolérantes aux fautes, d'une QRAM opérationnelle et de ressources adaptées, **cet algorithme reste, en 2025, inapplicable dans un cadre réel**, y compris pour des systèmes issus de la discrétisation d'équations aux dérivées partielles.

De nombreuses questions restent donc ouvertes quant à l'intérêt et à l'applicabilité des ordinateurs quantiques pour la résolution des EDP. C'est un sujet encore largement débattu au sein des communautés scientifiques, industrielles et institutionnelles.

¹ Bellman, R. E. (1957). **Dynamic programming**. Princeton University Press.

2.2 OBJECTIFS DU DOCUMENT

Ce livre blanc vise à **clarifier les défis actuels** liés aux Équations aux Dérivées Partielles, qui jouent un rôle fondamental dans de nombreux secteurs industriels et scientifiques. Malgré des avancées significatives en matière de modélisation et de calcul numérique, les **limitations des approches classiques** entravent l'efficacité des simulations dans les domaines critiques. Les contraintes en **temps de calcul, précision et scalabilité** rendent nécessaires l'exploration de nouvelles approches pour améliorer la résolution des EDP. Ce document s'appuie sur les expertises de plusieurs acteurs industriels et académiques pour dresser un état des lieux des limites actuelles et identifier les **verrous technologiques** à lever.

L'objectif est également d'**identifier les opportunités offertes par de nouvelles méthodes** pour pallier ces limitations. L'**informatique quantique**, les **réseaux de tenseurs** et les **modèles hybrides IA-numérique** sont des pistes prometteuses pour améliorer l'efficacité et la précision des calculs. En s'appuyant sur des cas concrets issus des partenaires industriels tels que **Crédit Agricole, Sanofi, TotalEnergies, Renault, SNCF**, ce livre blanc propose une **analyse détaillée des bénéfices attendus** par l'intégration de ces nouvelles approches. Chaque secteur présente des besoins spécifiques : la **finance** doit optimiser ses modèles de risque et de prévision², l'**industrie automobile** cherche à améliorer la conception et la simulation des matériaux, tandis que le secteur de l'**énergie** s'efforce de mieux modéliser les écoulements de fluides et l'optimisation des infrastructures énergétiques³.

Enfin, ce document vise à **proposer une feuille de route pour les futures collaborations**, afin de structurer les efforts de recherche et développement autour des EDP et de leur évolution vers des méthodes plus performantes. Il s'agit de **favoriser les synergies** entre les entreprises, les centres de recherche et les institutions académiques pour tester et valider les nouvelles approches sur des **cas d'usage réels**. La mise en place d'expérimentations pilotes, le développement de **protocoles de validation**, et la définition de **jalons technologiques** permettront d'accélérer l'adoption de ces technologies. Les partenaires joueront un rôle clé dans la structuration de cette démarche en partageant leurs besoins, leurs retours d'expérience et en contribuant à la définition des orientations stratégiques pour les années à venir.

2.3 GUIDE DE LECTURE

Ce livre blanc a pour objectif d'explorer en profondeur les **équations aux dérivées partielles (EDP)** et les approches de résolution, qu'elles soient classiques ou issues de nouvelles méthodes comme le calcul quantique, les réseaux de tenseurs ou l'intelligence artificielle.

Selon les centres d'intérêt du lecteur, plusieurs parcours de lecture sont possibles :

- Celles et ceux qui souhaitent revoir les bases mathématiques et physiques des EDP trouveront les notions essentielles dans **le chapitre 3**, qui présente leur définition, leurs rôles et leur importance industrielle.
- Les lecteurs intéressés par les applications pratiques et sectorielles pourront se tourner vers **le chapitre 4**, consacré aux typologies d'EDP et à leurs cas d'usage, ainsi que vers **le chapitre 6**, qui rassemble la vision et les retours concrets des partenaires industriels.

² Glasserman, P. (2004). **Monte Carlo Methods in Financial Engineering**. Springer, Applications of Mathematics (Vol. 53). ISBN: 978-0387004518.

³ Bear, J. (1972). **Dynamics of Fluids in Porous Media**. Elsevier, New York. ISBN: 978-0486656755.

- Pour comprendre les méthodes classiques de résolution et leurs limites, **le chapitre 5** constitue une référence, notamment en lien avec les enjeux du calcul haute performance, complétés par la perspective du **chapitre 11**.
- Les lecteurs qui souhaitent découvrir le potentiel du calcul quantique trouveront une présentation détaillée dans **le chapitre 7**, enrichie par une réflexion sur les défis technologiques et la convergence avec le HPC dans **le chapitre 12**.
- Ceux qui s'intéressent aux approches alternatives et hybrides pourront approfondir les réseaux de tenseurs dans **le chapitre 8**, les synergies entre quantique, réseaux de tenseurs et IA dans **le chapitre 9**, et enfin les perspectives dans **le chapitre 11**.
- Les lecteurs plus experts, à la recherche d'éléments techniques avancés, pourront se reporter aux annexes (**chapitre 14**). Celles-ci contiennent notamment une résolution détaillée de l'équation de Poisson par l'algorithme HHL, des précisions sur les réseaux de tenseurs et des cas d'usage spécifiques proposés par les partenaires.
- Enfin, ceux qui souhaitent prendre du recul et obtenir une vision stratégique et prospective pourront s'appuyer sur **le chapitre 12**, qui expose les principaux défis à venir, et sur **le chapitre 13**, qui propose une synthèse et une mise en perspective de l'impact global des nouvelles approches sur la science et l'industrie.

2.4 LE HUB QUANTIQUE CEA

Ce travail est un travail collaboratif réalisé dans le cadre du Hub Quantique⁴ du CEA Grenoble Alpes. Cette initiative vise à **explorer les limites et les possibilités du calcul quantique appliqué à des cas d'usages réels**, en créant les conditions de collaboration entre les mondes économiques et académiques.

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, Bull, Exaion.

Dans son parcours ACCESS, le Hub Quantique 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 Maison de Quantique Alpes et plus largement les spécialistes nationaux et internationaux des thématiques du domaine, le Hub Quantique 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

⁴ Pour en savoir plus, n'hésitez pas à suivre <https://yspot.fr/hub-quantique/>

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.

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 .

3. ÉQUATIONS AUX DERIVEES PARTIELLES : FONDEMENTS ET IMPORTANCE INDUSTRIELLE

Les Équations aux Dérivées Partielles sont au cœur de la modélisation scientifique et industrielle, car elles permettent de décrire des phénomènes fondamentaux dans divers domaines.

3.1 DEFINITION DES EDP DANS LA MODELISATION DES PHENOMENES PHYSIQUES ET PROCESSUS INDUSTRIELS

Ce sont des relations mathématiques qui relient une fonction inconnue de plusieurs variables indépendantes à ses dérivées partielles. Elles permettent de **modéliser des phénomènes physiques ou industriels qui évoluent dans l'espace et le temps**, comme la propagation de la chaleur, la dynamique des fluides, les théories de la gravitation, de l'électromagnétisme, ou des mathématiques financières. Une EDP s'écrit sous la forme générale :

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

où $u(x_1, \dots, x_n)$ est la fonction inconnue, et x_i sont les variables indépendantes. Les EDP sont classées selon leur nature mathématique : elliptiques (ex. équation de Laplace), paraboliques (ex. équation de la chaleur) et hyperboliques (ex. équations des ondes). Leur résolution analytique est souvent impossible dans des cas réalistes, ce qui impose le recours à des méthodes numériques avancées.

L'enjeu principal réside dans la précision des solutions obtenues, car des approximations mal maîtrisées peuvent entraîner des erreurs critiques dans la prédiction de phénomènes complexes. Avec l'essor des simulations et des techniques hybrides (intelligence artificielle, quantique, réseaux de tenseurs), de nouvelles perspectives émergent pour améliorer la résolution des EDP à grande échelle^{5 6 7 8 9}.

3.2 DIFFERENCE ENTRE EQUATIONS AUX DERIVEES ORDINAIRES (EDO) ET EDP

Les Équations aux Dérivées Ordinaires (EDO) et les EDP se distinguent principalement par le nombre de variables indépendantes en jeu. Une EDO décrit l'évolution d'une fonction à une seule variable indépendante, comme le temps, et s'écrit sous la forme générale :

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

En revanche, **une EDP implique des dérivées partielles par rapport à plusieurs variables**, ce qui la rend bien plus complexe à résoudre. Par exemple, l'équation du mouvement d'un pendule simple est une EDO, tandis que la propagation des vagues sur un plan d'eau est décrite par une EDP.

⁵ Patel, R. (2022). Quantum-Inspired Tensor Neural Networks for Partial Differential Equations. *arXiv:2208.02235*.

⁶ Farea, A. (2025). QCINN: Quantum Classical Physics-Informed Neural Networks for Solving PDEs. *arXiv:2503.16678*.

⁷ Werner, A. H. (2024). Hybrid Tree Tensor Networks for Quantum Simulation. *PRX Quantum*.

⁸ Biamonte, J. (2023). Tensor Networks for Quantum Machine Learning. *Proceedings of the Royal Society A*.

⁹ Perelshtein, M. (2022). Practical Application-Specific Advantage Through Hybrid Quantum Computing. *arXiv:2205.04858*.

Une conséquence majeure de cette différence est la nature des solutions : les EDO admettent généralement des solutions sous forme de fonctions explicites, alors que les EDP nécessitent souvent des techniques de résolution avancées comme la séparation de variables, la transformée de Fourier ou des méthodes numériques. Cela nécessite des méthodes analytiques ou numériques avancées, souvent impossibles sans puissance de calcul élevée.

3.3 RÔLE DES CONDITIONS AUX LIMITES DANS LA RÉSOLUTION DES EDP

Une équation EDP ne définit qu'une partie du problème à résoudre. En effet, si l'EDP encode la structure mathématique d'un phénomène physique – souvent sous la forme d'une relation locale entre des variations spatiales et/ou temporelles d'une grandeur – elle est insuffisante pour spécifier une solution unique. Pour qu'un problème soit bien posé au sens de Hadamard (existence, unicité, stabilité), il est impératif de spécifier des **conditions supplémentaires**, appelées **conditions aux limites (ou conditions au bord)** et, dans le cas d'EDP évolutives, des **conditions initiales**.

3.3.1 Définition et typologie des conditions aux limites

Les conditions aux limites (CAL) sont des contraintes imposées à la solution sur le bord du domaine spatial où l'EDP est défini. Elles ancrent le problème dans une réalité physique ou fonctionnelle et garantissent l'unicité et la pertinence de la solution. Sans conditions aux limites bien posées, une EDP peut admettre plusieurs solutions ou aucune solution exploitable.

Les principales familles de conditions aux limites sont les suivantes :

- **Conditions de type valeur imposée** : la solution prend une valeur fixée sur le bord, par exemple une température déterminée sur une paroi.
- **Conditions de type flux ou dérivée imposée** : la variation normale ou le flux est spécifié, comme un gradient de concentration ou un flux thermique.
- **Conditions mixtes** : combinaison linéaire d'une valeur et d'un flux, par exemple lors d'échanges thermiques avec l'environnement.
- **Conditions périodiques** : la solution est supposée identique sur deux bords opposés, ce qui permet de modéliser des structures répétitives ou des milieux infinis.

Ces typologies constituent un cadre de référence général. Les détails techniques et les implications numériques seront développés dans le **chapitre 7.7** consacré aux méthodes de résolution.

3.3.2 Importance physique et interprétation

Sur le plan **physique**, les conditions aux limites traduisent les interactions entre le système modélisé et son environnement : une température imposée sur une surface, une paroi isolée, un champ électrique appliqué, etc. Elles jouent un rôle crucial pour qu'une modélisation soit **faissable** et **réaliste**.

Sur le plan **mathématique et numérique**, elles permettent de **clôre le système d'équations** et d'assurer l'unicité de la solution numérique. Ignorer ou mal poser les CAL conduit à des solutions non uniques, instables, ou non pertinentes sur le plan physique.

3.3.3 Influence sur la discrétisation et les solveurs numériques

Dans la pratique industrielle, les conditions aux limites représentent l'une des entrées principales du **problème à résoudre**. Lorsqu'une EDP est introduite dans un **solveur numérique**, ce sont les conditions aux limites qui définissent la majorité des paramètres du cas d'usage réel. Autrement dit, la difficulté ou la spécificité d'un problème ne vient souvent pas tant de l'EDP elle-même – qui peut être connue ou canonique – que de la **complexité de ses conditions aux limites du système**.

Les solveurs (FEM, FVM, etc.) doivent intégrer ces CAL dans leur schéma de discrétisation. Cela a un impact direct sur :

- la **construction du maillage**,
- la **définition des matrices de bord**,
- l'**efficacité du solveur linéaire ou non linéaire** utilisé,
- et parfois sur le **conditionnement numérique du problème**.

De manière plus avancée, dans des approches inspirées du machine learning (physics-informed neural networks, méthodes variationnelles), les conditions aux limites sont **incorporées dans la fonction de coût ou de pénalisation**, ce qui illustre leur rôle central dans les approches contemporaines.

3.3.4 Conséquences pour les approches quantiques

L'existence de solutions analytiques (formes exactes avec des fonctions usuelles) est rare et limitée à des cas simplifiés. Dans la majorité des applications industrielles et scientifiques que nous allons développer par la suite, il faut avoir recours aux méthodes numériques : différences finies, éléments finis ou volumes finis¹⁰. Ces méthodes permettent d'obtenir des solutions approximées avec un niveau de précision contrôlé¹¹, mais nécessitent une puissance de calcul importante, notamment pour des simulations en 3D.

Dans le contexte des méthodes de résolution quantique abordées dans la section 7, le **traitement des conditions aux limites constitue un point technique majeur**. À ce jour, de nombreuses publications montrent que l'encodage des conditions aux limites dans des algorithmes quantiques, notamment dans les circuits variationnels ou les approches par simulation analogique, est un **frein à la généralisation**. Il s'agit d'un **point dur algorithmique** encore en phase de recherche, notamment pour les problèmes avec bords complexes, discontinuités ou non-linéarités.

3.4 POURQUOI LES EDP SONT UN ENJEU INDUSTRIEL MAJEUR ?

Les EDP sont un des piliers fondamentaux de la modélisation mathématique. Aujourd'hui, de nombreux secteurs industriels et scientifiques reposent sur ces équations pour concevoir, optimiser et prédire le comportement de systèmes complexes. Leur utilisation va de la simulation du climat à la modélisation financière, en passant par l'aéronautique, la santé et l'énergie^{12 13}.

¹⁰ Sherwin, S. J. (2005). **Finite Difference, Finite Element and Finite Volume Methods for Partial Differential Equations**. *Journal of Computational Physics*.

¹¹ LeVeque, R. J. (2007). **Numerical Methods for Partial Differential Equations: Finite Difference and Finite Volume Methods**. *SIAM*.

¹² Evans, L. C. (2010). **Partial Differential Equations (2nd ed.)**. *American Mathematical Society*.

¹³ Quarteroni, **Numerical Models for Differential Problems (3rd ed.)**, 2017.

Cependant, la résolution des EDP reste un défi majeur : elle exige une puissance de calcul toujours plus grande et des algorithmes toujours plus efficaces¹⁴ et il reste de nombreuses limitations à surmonter¹⁵.

3.4.1 Applications dans les sciences fondamentales (physique, chimie, biologie)

Les EDP sont un outil incontournable pour comprendre le monde qui nous entoure. En physique, elles régissent la mécanique des fluides (équations de Navier-Stokes), l'électromagnétisme (équations de Maxwell), la mécanique quantique¹⁷, etc. Partant de ces modèles, ils sont alors utilisés dans la conception d'avions, de satellites et de dispositifs médicaux¹⁸. En chimie, les EDP permettent de simuler les réactions et les transferts de chaleur, essentiels pour l'industrie pharmaceutique et les procédés industriels¹⁹. En biologie, elles modélisent la propagation des maladies et l'interaction des molécules dans le corps humain²⁰. Elles sont au centre des sciences appliquées, mais aussi dans l'ingénierie moderne.

3.4.2 Applications dans l'ingénierie et l'industrie (fluides, matériaux, climatologie, énergie, finance)

Dans un contexte industriel, elles sont utilisées pour optimiser la conception, améliorer la fiabilité des systèmes et simuler des scénarios critiques sans recourir à des expérimentations coûteuses.

Dans le domaine de la fabrication, les EDP permettent d'analyser les contraintes mécaniques et thermiques lors des processus de moulage, de soudage ou d'impression 3D. La modélisation des transferts de chaleur et des phénomènes de solidification est indispensable pour assurer la qualité des pièces produites et limiter les défauts structuraux. Par exemple, la simulation de la cristallisation dans la fabrication additive métallique repose sur la résolution d'équations de transport thermique couplées à des phénomènes de changement de phase²¹.

En climatologie et génie environnemental, les EDP prédisent l'évolution des systèmes météorologiques et doivent modéliser la dispersion des polluants. Les modèles atmosphériques, tels que ceux utilisés pour prévoir le changement climatique, reposent sur des équations aux dérivées partielles décrivant la dynamique des fluides compressibles et la thermodynamique de l'air humide²². Ces simulations nécessitent une résolution spatiale et temporelle fine, ce qui implique des ressources computationnelles considérables. En modélisation climatique et environnementale, les EDP permettent d'anticiper l'impact des énergies renouvelables sur le réseau électrique. Les équations de Navier-Stokes et de transport-réaction décrivent les interactions complexes entre l'atmosphère, les océans et la surface terrestre, contribuant à une meilleure gestion des infrastructures énergétiques.

L'industrie aérospatiale et défense exploite largement les EDP pour simuler le comportement des matériaux soumis à des conditions extrêmes, comme l'entrée atmosphérique des véhicules spatiaux ou la propagation des ondes de choc lors d'explosions. La mécanique des structures et la dynamique des fluides numériques (CFD) permettent d'optimiser la conception des avions, des fusées et des

¹⁴ Trefethen, L. N. (2000). *Spectral Methods in MATLAB*. SIAM.

¹⁵ Arute, F. (2019). *Quantum supremacy using a programmable superconducting processor*. *Nature*, 574(7779), 505–510.

¹⁶ Harrow, A. W. (2009). *Quantum algorithm for solving linear systems of equations*. *Physical Review Letters*, 103(15), 150502.

¹⁷ Landau, L. D. (1987). *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (3rd ed.). Pergamon Press.

¹⁸ Anderson (1995). *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications*.

¹⁹ LeVeque, R. J. (2007). *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems*. SIAM.

²⁰ Keener, J. (1998). *Mathematical Physiology*. Springer.

²¹ Boettinger. (2000). *Phase-field simulation of solidification*.

²² Holton, J. R. (2012). *An Introduction to Dynamic Meteorology* (5th ed.). Academic Press.

systèmes de propulsion²³. La modélisation des vibrations et des contraintes mécaniques à haute fréquence est également un enjeu clé dans la fabrication de composants électroniques embarqués pour l'aéronautique.

En science des matériaux, les EDP sont utilisées pour étudier le comportement des nouveaux matériaux, tels que les superalliages et les composites, soumis à des sollicitations mécaniques et thermiques. La diffusion des impuretés dans les semi-conducteurs, la formation de microstructures dans les alliages ou la propagation des fissures dans les structures critiques sont des phénomènes régis par des équations différentielles complexes²⁴. Ces simulations permettent de réduire les cycles de test et d'améliorer la durabilité des matériaux utilisés dans des environnements extrêmes.

Les réseaux énergétiques intelligents (les smart grids) sont un autre domaine où les EDP jouent un rôle majeur. La gestion de la distribution électrique, l'équilibrage de la charge et la modélisation des flux d'énergie dans les réseaux à grande échelle nécessitent de résoudre des équations de type Maxwell couplées à des modèles de dissipation thermique et de gestion des ressources intermittentes²⁵.

Enfin, dans le secteur de la santé et des biotechnologies, les EDP sont utilisées pour modéliser le transport des médicaments dans l'organisme, la propagation des ondes dans les tissus biologiques en imagerie médicale, ou encore la dynamique des fluides dans les vaisseaux sanguins. L'analyse du flux sanguin et des phénomènes de turbulence dans les artères sont un enjeu pour prévenir des pathologies comme l'athérosclérose et repose sur la résolution des équations de Navier-Stokes adaptées aux écoulements biologiques²⁶. Ces avancées permettent d'optimiser les dispositifs médicaux, comme les stents ou les valves cardiaques artificielles. Les avancées du HPC ont considérablement amélioré la capacité à résoudre ces équations avec précision, ouvrant la voie à une meilleure compréhension des phénomènes biologiques complexes et à l'optimisation de nombreux dispositifs médicaux. Plus récemment, l'utilisation de l'intelligence artificielle et de l'apprentissage automatique a ouvert de nouvelles perspectives pour la résolution des EDP, en permettant des approches hybrides qui combinent la puissance des modèles physiques avec les capacités d'apprentissage des algorithmes modernes.

3.5 BESOINS CROISSANTS EN PUISSANCE DE CALCUL ET LIMITATIONS DES APPROCHES ACTUELLES

Les besoins en puissance de calcul augmentent de manière « exponentielle » dans le domaine des EDP, en raison de la complexité croissante des simulations et de l'énorme volume de données à traiter. Les EDP sont au cœur des simulations numériques avec des modèles de plus en plus détaillés nécessaires pour obtenir des résultats précis. Cependant, les méthodes classiques de résolution des EDP, telles que les différences finies, les éléments finis et les volumes finis, souffrent de **limitations importantes** en termes de temps de calcul et de mémoire²⁷. Ces méthodes nécessitent des ressources massives, en particulier pour des maillages fins et des simulations tridimensionnelles sur de grandes échelles ou bien, des approximations à gros grains. Les **limitations en précision** sont également un défi majeur, en particulier lorsqu'il s'agit de modéliser des phénomènes complexes comme les interactions multi-physiques ou les phénomènes stochastiques²⁸. L'utilisation de **supercalculateurs** pour traiter ces

²³ Anderson, (1995). **Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications**.

²⁴ Cahn, J. W. (1958). **Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy**. *The Journal of Chemical Physics*, 28(2), 258–267.

²⁵ Kundur, P. (1994). **Power System Stability and Control**. McGraw-Hill.

²⁶ Quarteroni, A. (2019). **Mathematical Modelling of the Human Cardiovascular System: Data, Numerical Approximation, Clinical Applications**, Cambridge University Press.

²⁷ Toselli, A. (2005). **Domain Decomposition Methods - Algorithms and Theory** (Vol. 34). Springer.

²⁸ Versteeg, (2007). **An Introduction to Computational Fluid Dynamics**.

tâches est devenue courante, mais les défis liés à la **scalabilité** et à l'**efficacité énergétique** restent des obstacles importants²⁹. De plus, les **erreurs numériques** accumulées lors de simulations sur de longues périodes rendent les résultats peu fiables dans certains cas, et les **approches hybrides** classiques, combinant les méthodes numériques avec des techniques de modélisation plus sophistiquées, ne parviennent pas toujours à surmonter ces défis³⁰. La **quantification de l'incertitude** dans les modèles de simulation devient également plus difficile à gérer à mesure que les modèles deviennent plus complexes.

Pour répondre à ces défis de taille, il existe un besoin croissant d'explorer de nouvelles approches qui offriraient potentiellement des gains significatifs en termes de vitesse et de précision de manière plus efficace³¹. Les **simulateurs quantiques** sont particulièrement prometteurs, car ils pourraient permettre de traiter des systèmes complexes en réduisant le besoin en ressources classiques tout en améliorant la précision des résultats³².

²⁹ Dongarra, J. J. (2014). **The LINPACK benchmark: Past, present and future.** *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, 26(7), 1297-1317.

³⁰ Dube, M. (2012). **Modeling and Simulation of the Industrial Process Using Computational Fluid Dynamics.** *Proceedings of the ASME 2012 International Mechanical Engineering Congress & Exposition, USA.*

³¹ Cichocki, A. (2017). **Nonlinear component analysis: Hidden component analysis, robust PCA, and applications.** *Proceedings of the IEEE*, 105(4), 652-679.

³² Harrow, A. (2009). **Quantum algorithm for linear systems of equations.** *Physical Review Letters*

4. TYPOLOGIES DES EDP ET CAS D'USAGE ASSOCIES

Dans ce chapitre, nous allons détailler les différents types d'EDP et leurs applications dans différents domaines scientifiques et industriels.

4.1 EDP ELLIPTIQUES (EX. ELECTROSTATIQUE, CONDUCTION, MATERIAUX)

Les équations aux dérivées partielles **elliptiques** jouent un rôle fondamental dans la modélisation des phénomènes stationnaires où l'évolution temporelle est négligeable. Parmi elles, l'**équation de Laplace** et l'**équation de Poisson** sont largement utilisées pour décrire des phénomènes physiques et industriels. Ces équations prennent la forme :

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

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

où (Δ) représente le laplacien, défini par : $[\Delta u = \nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}]$ en trois dimensions. L'équation de Laplace est un cas particulier de l'équation de Poisson lorsque $f = 0$, représentant ainsi un système en équilibre (voir Evans, 2010).

4.1.1 Secteurs d'applications

Mécanique des Fluides Numériques :

En dynamique des fluides, les équations de Navier–Stokes régissent le comportement des écoulements en traduisant la conservation de la masse et de la quantité de mouvement. L'une des difficultés majeures de leur résolution est le couplage pression–vitesse : pour garantir l'incompressibilité du fluide il est nécessaire d'introduire une relation entre la pression et le champ de vitesse.

Les méthodes numériques usuelles (projection, PISO, SIMPLE) réécrivent ce couplage sous la forme d'une équation de Poisson pour la correction de pression (**comme détaillé plus loin dans la partie consacrée aux EDP hyperboliques**).

La résolution de cette équation représente une étape incontournable des solveurs de mécanique des fluides numériques (CFD) et constitue l'un des principaux goulets d'étranglement en termes de coût de calcul sur architectures classiques.

Électrostatique :

L'équation de Laplace est centrale en électrostatique pour décrire le **potentiel électrique** ϕ dans des régions sans charge : $\nabla^2 \phi = 0$

Elle permet de modéliser la répartition du champ électrique dans des dispositifs tels que les condensateurs, les guides d'ondes ou les semi-conducteurs³³.

L'**équation de Poisson** est utilisée lorsqu'une distribution de charge ρ est présente :

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\varepsilon}$$

³³ J. D. Jackson. (1999), **Classical Electrodynamics**, 3^e édition, Wiley.

où ε est la permittivité du milieu. Ces équations sont essentielles en microélectronique pour optimiser la conception des transistors et des circuits intégrés³⁴.

Gravitation :

En astrophysique, l'équation de Poisson modélise le potentiel gravitationnel Φ généré par une distribution de masse ρ_m :

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi G \rho_m$$

où G est la constante gravitationnelle. Elle est utilisée dans la simulation de galaxies, la formation des étoiles et la prédiction des trajectoires de corps célestes³⁵.

Conduction thermique :

Dans le cadre du transfert de chaleur, une situation stationnaire (sans variation temporelle) est décrite par l'**équation de Laplace** : $\nabla^2 T = 0$ où T représente la température. Lorsqu'une source de chaleur est présente, on utilise l'**équation de Poisson** (relation entre T et ϕ , densité de chaleur produite et distribution de charge)³⁶. Ces équations sont fondamentales en ingénierie pour la conception de systèmes de refroidissement, l'optimisation thermique des bâtiments et la gestion thermique des batteries lithium-ion.

4.1.2 Secteurs d'applications industrielles

Microélectronique et semi-conducteurs :

L'industrie des semi-conducteurs s'appuie sur l'**équation de Poisson** pour modéliser la distribution du potentiel électrique dans les transistors et les circuits intégrés (voir équation conduction thermique).

Cette équation est cruciale pour le design des transistors MOSFET, des capteurs MEMS et des dispositifs quantiques (*voir aussi Sze, 2006 : **Physics of Semiconductor Devices***). Dans les technologies avancées, comme les transistors FinFET, la résolution précise de cette EDP permet d'optimiser la dissipation thermique et d'améliorer les performances des circuits³⁷.

Énergie et optimisation des batteries :

Dans l'industrie énergétique et automobile, la **conduction thermique stationnaire** est décrite par l'**équation de Laplace**.

Cette équation est utilisée pour simuler la dissipation thermique dans les batteries lithium-ion et les systèmes de refroidissement des véhicules électriques³⁸. L'optimisation de ces processus permet d'augmenter la durée de vie des batteries et d'améliorer leur efficacité énergétique.

Dans l'extraction pétrolière et gazière, l'équation de Poisson est appliquée à la **simulation des écoulements dans les réservoirs souterrains** (où P est la **pression**, q le débit de fluide et k la perméabilité du réservoir). Ces simulations sont essentielles pour améliorer les stratégies d'exploitation et réduire l'impact environnemental.

³⁴ Sze, S. M. (2006). **Physics of Semiconductor Devices (3rd ed.)**. Wiley-Interscience, Hoboken, NJ. ISBN: 978-0471143239.

³⁵ Binney, J. (2008). **Galactic Dynamics (2nd ed.)**. Princeton University Press, Princeton, NJ. ISBN: 978-0691130279.

³⁶ Carslaw, H. S. (1959). **Conduction of Heat in Solids (2nd ed.)**. Oxford University Press. ISBN: 978-0198533689.

³⁷ Baccarani, G. (1983). **Performance Evaluation and Simulation of VLSI Circuits Using Differential Equations**. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 2(4), 396-406.

³⁸ Pesaran, A. A. (2013). **Large Scale Simulation of Power Systems Using Differential Equations**. *IEEE Transactions on Power Systems*, 28(3), 2356-2367.

Aéronautique et ingénierie des matériaux :

L'aérodynamique et la conception des structures en aéronautique nécessitent la résolution des **équations de potentiel en écoulement stationnaire**, dérivées de l'**équation de Laplace** : $\Delta\Phi = 0$ où Φ est le **potentiel de vitesse** d'un fluide en régime stationnaire³⁹. Ces équations permettent d'optimiser la forme des ailes et des carénages pour minimiser la traînée et améliorer l'efficacité énergétique des avions.

Dans le domaine des matériaux, l'équation de Poisson est utilisée pour modéliser les **contraintes mécaniques** dans les structures composites et les alliages métalliques : $\nabla^2\sigma = f$ où σ est le **champ de contrainte mécanique** et f représente les forces appliquées. Ces simulations sont indispensables pour garantir la fiabilité et la sécurité des composants aéronautiques et spatiaux.

Transports et infrastructures :

L'équation de Poisson est également employée dans l'étude des **structures ferroviaires et civiles** pour simuler la répartition des charges sur les ponts et les voies ferrées⁴⁰ (*voir aussi Bathe, 2006*). En génie civil, elle permet de prévoir le comportement des bâtiments et des barrages sous diverses contraintes environnementales, optimisant ainsi leur durabilité et leur sécurité.

Dans la distribution électrique, les réseaux haute tension sont modélisés en résolvant l'équation de Poisson pour le champ électrique, permettant de dimensionner correctement les isolants et d'améliorer la fiabilité des infrastructures énergétiques⁴¹.

4.2 EDP PARABOLIQUES (EX. ÉQUATION DE LA CHALEUR, DIFFUSION)

Les **équations aux dérivées partielles (EDP) paraboliques** modélisent des phénomènes où une évolution temporelle est couplée à un processus de diffusion spatiale. Elles apparaissent dans de nombreux domaines scientifiques et technologiques, en particulier pour décrire la **propagation de la chaleur, la diffusion de particules, ou encore la dynamique des populations** (*voir aussi Evans, 2010*).

L'**équation de la chaleur**, qui est un cas particulier d'EDP parabolique, s'écrit sous la forme :

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

où $u(x,t)$ représente la **quantité diffusée** (température, concentration chimique, densité de population, etc.), α est un **coefficient de diffusion** et ∇^2 est le **laplacien** qui décrit la propagation spatiale. Cette équation est fondamentale en physique et en ingénierie pour modéliser l'évolution de nombreux systèmes dynamiques.

Les solutions analytiques sont possibles dans certains cas simples (comme la diffusion sur un domaine infini), mais la majorité des problèmes pratiques nécessitent des **méthodes numériques** (différences finies, éléments finis, volumes finis) pour obtenir des solutions précises. Ces méthodes sont largement utilisées dans les simulations industrielles, où elles permettent de prédire l'évolution d'un système et d'optimiser les processus physiques et financiers.

³⁹ Anderson, J. D. (2011). *Fundamentals of Aerodynamics*. McGraw-Hill Education.

⁴⁰ Bathe, K. (2006), *Finite Element Procedures*, Prentice Hall.

⁴¹ Gross, P. W. (2004). *Electromagnetic Theory and Computation: A Topological Approach*. Cambridge University Press.

Un autre exemple fondamental d'EDP parabolique est l'**équation de Black-Scholes**, utilisée en finance pour modéliser l'évolution du prix des options financières :

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

où $V(S, t)$ est la valeur de l'option, S le prix du sous-jacent, σ la volatilité et r le taux d'intérêt⁴². Cette équation met en évidence la nature **diffusive** des variations de prix sur les marchés financiers, similaire à la diffusion thermique.

4.2.1 Secteurs d'applications industrielles

Les EDP paraboliques sont utilisées dans de nombreux secteurs industriels pour modéliser des processus dynamiques impliquant la diffusion et l'évolution temporelle des systèmes physiques et financiers.

Gestion thermique et transport de chaleur :

L'**équation de la chaleur** est utilisée pour modéliser la dissipation thermique dans les moteurs, les batteries et les structures aéronautiques (où $T(x, t)$ est la **température**, et k le **coefficient de conductivité thermique** du matériau).

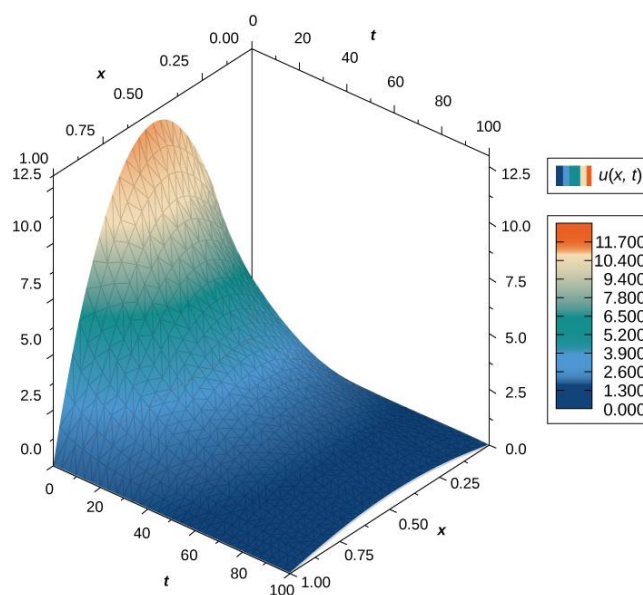


Figure 1 : Graphique d'une solution de l'équation de la chaleur dans une dimension au fil du temps⁴³.

Dans l'industrie automobile et aéronautique, cette équation permet d'optimiser les **systèmes de refroidissement** des moteurs thermiques et électriques. Elle est employée pour la **conception des**

⁴² Black, F. (1973). **The Pricing of Options and Corporate Liabilities**. *Journal of Political Economy*, 81(3), 637–654.

⁴³https://query.libretexts.org/Francais/Livre_%3A_Calculus_%28OpenStax%29/14%3A_Diff%C3%A9renciation_des_fonctions_de_plusieurs_variables/14.03%3A_D%C3%A9rivées_partielles

batteries et la gestion thermique des véhicules électriques afin d'améliorer leur autonomie et leur durabilité. Mais aussi pour simuler la dissipation de chaleur dans les ailes et fuselages en matériaux composites et même pour prévoir la **propagation thermique dans les centrales nucléaires**, optimisant ainsi le refroidissement des réacteurs.

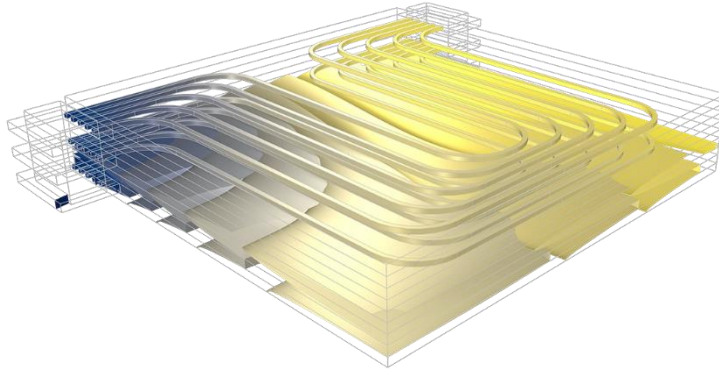


Figure 2 : Profil de température dans un pack de batteries à refroidissement liquide⁴⁴.

Dynamique des populations et épidémiologie

L'**équation de diffusion** est utilisée en biologie et en épidémiologie pour modéliser la propagation d'espèces ou d'infections :

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \nabla^2 N + rN \left(1 - \frac{N}{K}\right)$$

où $N(x, t)$ est la **densité de population**, D le **coefficient de diffusion**, r le **taux de croissance** et K la **capacité de charge**⁴⁵.

Dans le secteur pharmaceutique et biomédical, ce type d'équation est utilisé pour modéliser la diffusion **des molécules thérapeutiques** dans les tissus et pour mieux comprendre la propagation de certains phénomènes biologiques. Ces approches contribuent à l'optimisation des traitements et à l'analyse de dynamiques complexes en contexte de simulation. En épidémiologie, elle aide à simuler la propagation des épidémies et à concevoir des stratégies de vaccination.

⁴⁴ <https://www.comsol.fr/battery-design-module>

⁴⁵ Murray, J. D. (2002). **Mathematical Biology: I. An Introduction** (3rd ed.). Springer-Verlag.

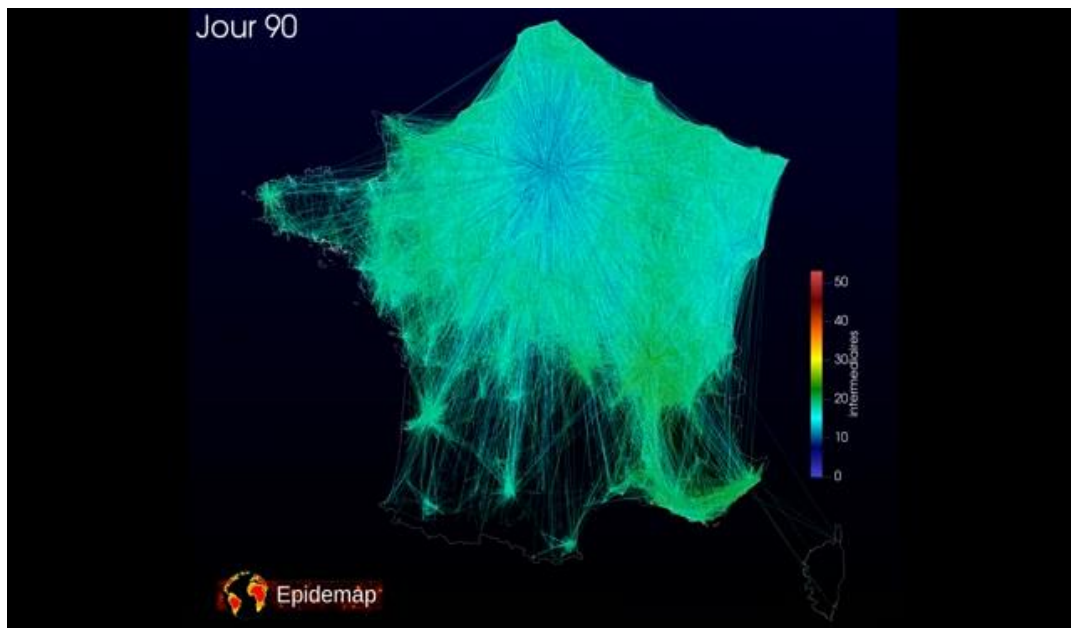


Figure 3 : Simulation de la chaîne de contamination du Covid en France (sans confinement)⁴⁶.

Modélisation financière et valorisation d'options :

L'équation de Black-Scholes, une variante de l'équation de diffusion, est utilisée en finance pour la valorisation des options.

Dans la finance, l'équation de Black-Scholes et ses variantes sont utilisées pour **la valorisation d'options, la couverture et l'analyse du risque sur des produits dérivés**. Ces modèles restent au cœur de nombreux dispositifs de simulation et d'aide à la décision dans les activités de marché et de gestion du risque. La résolution numérique de cette équation permet d'optimiser les stratégies d'investissement optimales de couverture et d'évaluer l'impact des fluctuations du marché.

⁴⁶ <https://www.youtube.com/watch?v=VZT8SQ1gljg&list=PLvLA8o80g-gHGStYzGY74Hfpx2XbH2qR&index=1>

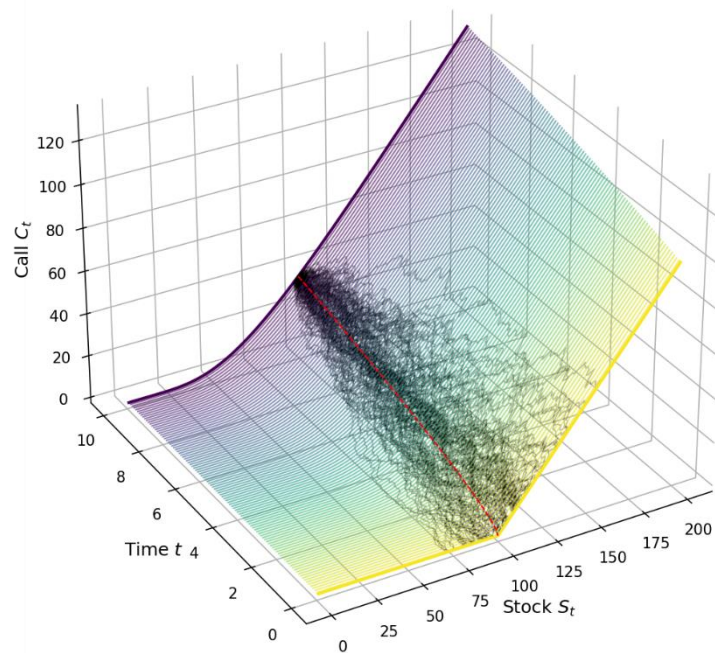


Figure 4 : Visualisation de la formule de Black-Scholes pour un prix initial de $S_0=100$, une dérive de 0.04 et une volatilité $=0.15$ sur une centaine de tirages⁴⁷.

La méthode des **options réelles** permet de modéliser des décisions d'investissement stratégiques dans d'autres industries (attendre, investir, abandonner) comme des options financières. Elle repose sur la même équation où $V(S, t)$ devient la valeur du projet, S la valeur actualisée nette de l'opportunité, σ la volatilité des flux futurs, et r le taux d'actualisation. Par exemple, une entreprise du secteur minier peut modéliser le droit d'ouvrir une nouvelle exploitation comme une option d'achat sur le prix futur des matières premières : elle n'investit que si les conditions deviennent favorables. Ce cadre est largement utilisé dans l'énergie, les télécoms, la pharmacie ou l'industrie lourde, pour intégrer l'incertitude dans les décisions à long terme⁴⁸.

4.3 EDP HYPERBOLIQUES (EX. PROPAGATION D'ONDES, ELECTROMAGNETISME ET FLUIDES COMPRESSIBLES)

Les EDP **hyperboliques** modélisent des phénomènes où des **ondes ou des signaux** se propagent à des vitesses finies. Contrairement aux EDP elliptiques et paraboliques, ces équations prennent en compte l'inertie et sont fondamentales dans la dynamique des fluides, l'électromagnétisme et l'acoustique.

L'une des formes les plus générales d'une EDP hyperbolique est donnée par l'équation d'onde :

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

où $u(x, t)$ représente l'amplitude de l'onde, c la vitesse de propagation et ∇^2 le **laplacien**. Cette équation est la base de nombreuses applications en mécanique des structures, acoustique et

⁴⁷ <https://gregorygundersen.com/blog/2024/09/28/black-scholes/>

⁴⁸ Dixit, A. K. (1994). **Investment Under Uncertainty**. Princeton University Press. ISBN: 978-0691034102.

propagation des signaux⁴⁹. Elle est particulièrement utilisée par l'industrie pétrolière dans le cadre de l'imagerie sismique et du problème inverse en sismique

Les équations de Navier-Stokes sont également des EDP hyperboliques lorsqu'elles modélisent l'écoulement des fluides compressibles, notamment en aérodynamique et en simulation climatique :

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

où $\mathbf{u}$ est le vecteur vitesse, ρ la densité, p la pression et ν la viscosité du fluide (*Batchelor, 1967*).

Enfin, les **équations de Maxwell** régissent la propagation des ondes électromagnétiques et sont utilisées dans le domaine des télécommunications et des systèmes radar :

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

où $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ sont les champs électriques et magnétiques, $\mathbf{H}$ et $\mathbf{D}$ leurs versions adaptées aux matériaux, et $\mathbf{J}$ est la densité de courant⁵⁰.

4.3.1 Secteurs d'applications industrielles

Les EDP hyperboliques sont essentielles dans des industries où la **propagation d'ondes ou la dynamique des fluides** joue un rôle clé.

Aérodynamique et conception automobile :

Les équations de Navier-Stokes permettent de modéliser l'écoulement de l'air autour des véhicules et des aéronefs. Elles sont utilisées pour optimiser l'aérodynamisme, **réduire la traînée et améliorer l'efficacité** énergétique dans l'automobile comme dans l'aéronautique.

⁴⁹ Courant, R. (1962). **Methods of Mathematical Physics**, Volume 1 (1st ed.). John Wiley & Sons.

⁵⁰ Jackson, J. D. (1999). **Classical Electrodynamics**. Wiley.

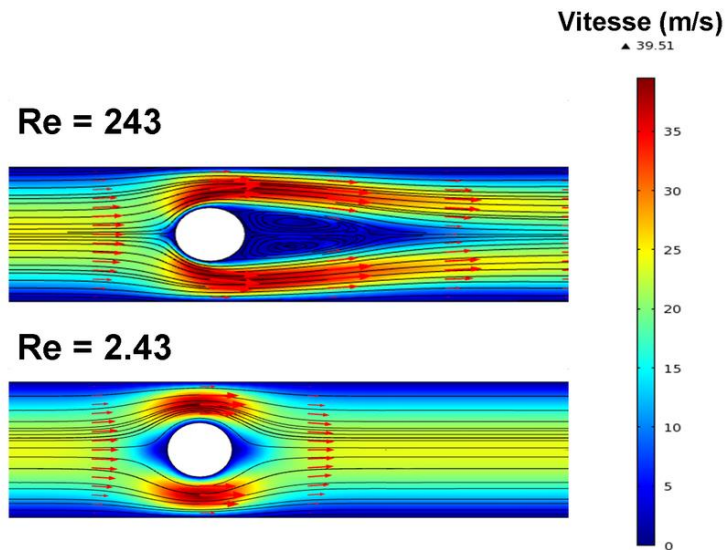


Figure 5 : Écoulement après l'obstacle en fonction du nombre de Reynolds⁵¹.

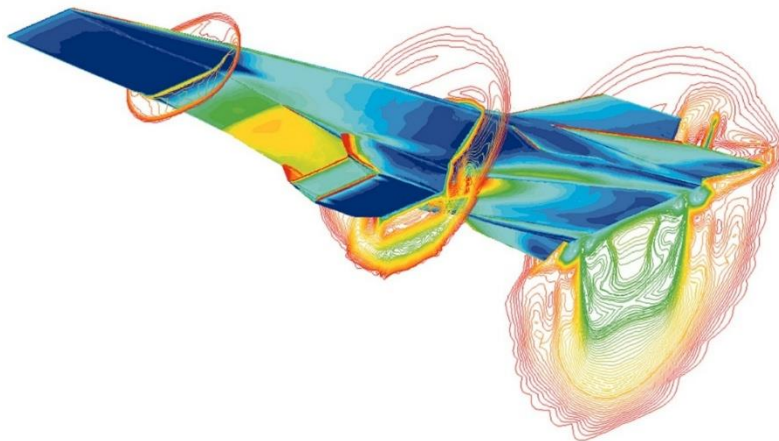


Figure 6 : Simulation du véhicule hypersonique NASA X-43 Scramjet, utilisant un code de Mécanique des Fluides Numérique⁵².

⁵¹ <https://doi.org/10.1051/j3ea/2011013>

⁵² <https://fr-academic.com/dic.nsf/frwiki/56740>

Acoustique et réduction du bruit :

L'équation d'onde permet de modéliser la propagation du son et des vibrations :

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

où $p(x, t)$ représente la pression acoustique.

Elle est mobilisée pour **l'analyse acoustique, la réduction du bruit** (ex. TGV en optimisant la conception des bogies et des infrastructures ferroviaires⁵³), **l'optimisation du confort et l'étude de la propagation d'ondes** dans des environnements complexes (conception de **systèmes sonar et radar** haute précision).

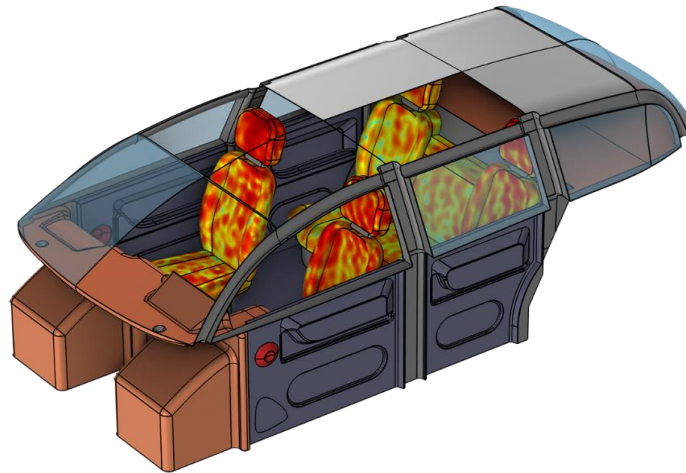


Figure 7 : Distribution de pression dans l'habitacle d'une voiture générée à 3 kHz par un haut-parleur médium situé dans la porte⁵⁴.

Propagation électromagnétique et télécommunications :

Les **équations de Maxwell** constituent un enjeu central pour les télécommunications, les systèmes radar et plus largement les architectures de détection. Dans ces domaines, les modèles physiques issus de l'électromagnétisme permettent d'anticiper la propagation des ondes.

Orange s'appuie sur des modèles de propagation radio fondés sur des approches physiques et sur des données de terrain pour concevoir et optimiser ses réseaux mobiles. Ces modèles sont utilisés pour le dimensionnement du réseau, l'installation de nouveaux sites, le réglage des antennes et l'amélioration de la couverture et de la qualité de service⁵⁵, notamment dans le contexte de la 5G⁵⁶.

⁵³ Morfey, C. L. (2001). **Dictionary of Acoustics**. Academic Press.

⁵⁴ <https://www.comsol.fr/acoustics-module>

⁵⁵ Taflov, A. (2005). **Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method (3rd ed.)**. Artech House.

⁵⁶ <https://hellofuture.orange.com/en/oranges-radio-propagation-model-an-essential-element-in-mobile-network-development/>

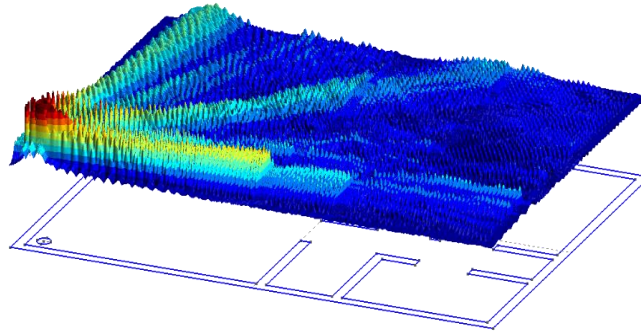


Figure 8 : Propagation d'une onde Wi-Fi dans un appartement. Sous la simulation est affiché le plan de l'appartement et la position du routeur (petit disque à gauche)⁵⁷.

4.4 EDP DISPERSIVES ET NON LINEAIRES (EX. KORTEWEG-DE VRIES, SCHRÖDINGER)

Les **EDP dispersives et non linéaires** décrivent des phénomènes où les ondes se propagent tout en **subissant des modifications de forme** en raison de la dispersion et de la non-linéarité. Elles jouent un rôle clé en **physique quantique, optique non linéaire, dynamique des plasmas et ingénierie des matériaux avancés**. Ces équations permettent de modéliser des effets complexes tels que la formation de solitons, les interactions entre ondes et la turbulence dans les fluides et plasmas.

Matériellement, ces EDP prennent des formes diverses en fonction du phénomène étudié. Deux classes fondamentales se distinguent :

1. **Les équations dispersives linéaires**, où les solutions se décomposent en modes propres qui se propagent avec des vitesses différentes.
2. **Les équations dispersives non linéaires**, où les interactions entre les modes modifient la dynamique du système, donnant naissance à des structures persistantes comme les solitons ou à des phénomènes chaotiques.

Parmi les équations les plus emblématiques, nous trouvons :

- **L'équation de Korteweg-de Vries (KdV)**, qui décrit la propagation des **solutions** dans des milieux non linéaires avec une dispersion dominante.
- **L'équation de Schrödinger non linéaire (NLS)**, qui modélise la propagation des impulsions en optique et en physique quantique.

4.4.1 Modélisation mathématique des EDP dispersives et non linéaires

L'équation de Korteweg-de Vries (KdV) et les solitons :

L'équation de KdV est une EDP non linéaire de troisième ordre qui décrit la propagation des ondes dans un fluide peu profond :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + 6u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

⁵⁷ <https://bthierry.pages.math.cnrs.fr/course-fem/lecture/numerical-simulation/EDP/>

où $u(x, t)$ est la hauteur de l'onde à un instant donné. Le second terme $6u \frac{\partial u}{\partial x}$ introduit la **non-linéarité**, qui tend à **former des crêtes abruptes**, tandis que le dernier terme $\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$ représente la **dispersion**, qui tend à **étalement des ondes**.

Une solution particulière est le **soliton**, une onde localisée qui conserve sa forme lors de la propagation :

$$u(x, t) = \frac{c}{\cosh^2 \left(\frac{\sqrt{c}}{2} (x - ct) \right)}$$

où c est la vitesse du soliton. Ce type de solution a des applications majeures en **optique non linéaire**, en **physique des plasmas** et en **hydrodynamique**.

L'équation de Schrödinger non linéaire (NLS) et la propagation des ondes dans les milieux non linéaires :

L'équation de Schrödinger non linéaire (NLS) est fondamentale en optique et en mécanique quantique. Elle s'écrit de la forme :

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

où $\psi(x, t)$ est l'amplitude de l'onde, $\nabla^2 \psi$ représente la **dispersion spatiale** et $|\psi|^2 \psi$ correspond au **terme non linéaire** modélisant l'interaction des ondes. Cette équation permet de comprendre :

- **Les solitons optiques**, où l'interaction entre la dispersion et la non-linéarité compense l'élargissement des impulsions lumineuses dans les fibres optiques.
- **Les condensats de Bose-Einstein**, où elle décrit l'évolution de systèmes quantiques fortement corrélés.

4.4.2 Secteurs d'applications industrielles

Télécommunications et réseaux optiques :

L'équation de Schrödinger non linéaire est utilisée pour modéliser la propagation des impulsions lumineuses dans les fibres optiques haute performance. Sous des formes généralisées intégrant dispersion, non-linéarité, pertes et amplification, elle constitue un cadre de référence pour l'analyse des limitations de transmission et pour le développement de techniques de compensation numérique du signal. Dans les systèmes de communications optiques cohérentes, ces approches sont notamment mobilisées pour atténuer les effets de dispersion chromatique et certaines dégradations non linéaires affectant la qualité de transmission. La forme généralisée en présence de pertes et d'amplification est :

$$i \frac{\partial A}{\partial z} + \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - \gamma |A|^2 A + i\alpha A = 0$$

où $A(z, t)$ est l'amplitude du champ optique, β_2 est le paramètre de dispersion, γ est le coefficient de non-linéarité et α représente les pertes.

Des acteurs comme **Nokia Bell Labs**⁵⁸ mobilisent explicitement ce cadre dans leurs travaux sur les systèmes cohérents à fibre optique, notamment pour analyser les effets non linéaires de propagation et développer des techniques de compensation numérique du signal⁵⁹.

Physique des plasmas et fusion nucléaire :

Les plasmas sont modélisés par des équations de type KdV et des généralisations non linéaires des équations de Navier-Stokes :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (nv) = D\nabla^2 n - \alpha n^2$$

où $n(x, t)$ est la densité du plasma, v est la vitesse des particules et D est le coefficient de diffusion. Ces modèles sont cruciaux pour **optimiser le confinement des plasmas dans les réacteurs à fusion nucléaire**⁶⁰.

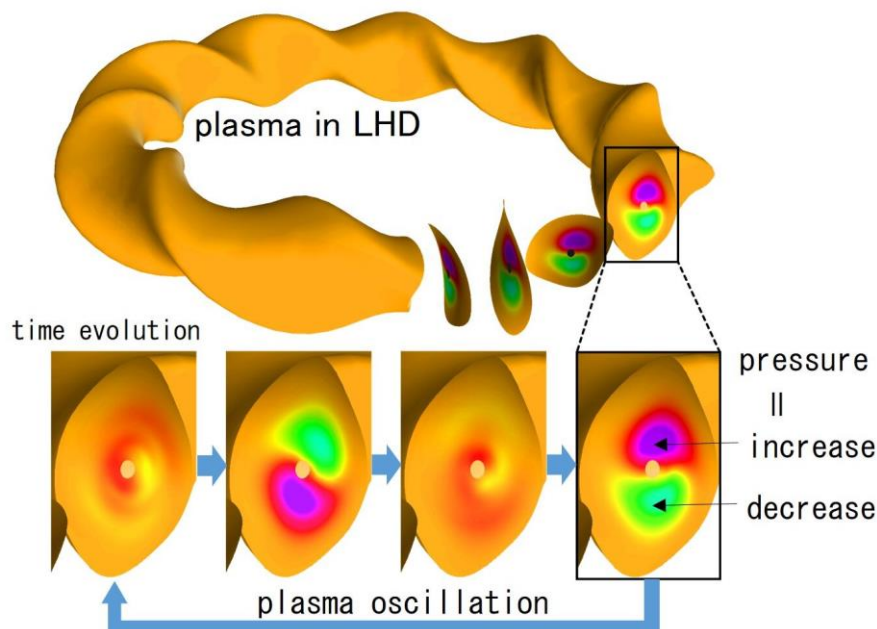


Figure 9 : Oscillations de plasma générées par des particules de hautes énergies dans le LHD⁶¹.

Ingénierie des matériaux et semi-conducteurs

L'équation de Schrödinger non linéaire est utilisée pour modéliser :

- **Les nanostructures électroniques** dans les semi-conducteurs avancés.
- **Les transistors à effet tunnel** et les **qubits supraconducteurs** où l'ingénierie quantique exploite la dynamique des états électroniques⁶².

⁵⁸<https://www.nokia.com/bell-labs/publications-and-media/publications/a-theory-of-nonlinear-signal-noise-interactions-in-wavelength-division-multiplexed-coherent-systems/>

⁵⁹ Agrawal, G. P. (2012). **Nonlinear Fiber Optics (5th ed.)**. Academic Press.

⁶⁰ Hazeltine, R. D. (2003). **Plasma Confinement (Revised Edition)**. Dover Publications.

⁶¹ <https://phys.org/news/2019-08-simulations-ion-plasma-oscillations-fusion.html>

⁶² Datta, S. (2005). **Quantum Transport: Atom to Transistor**. Cambridge University Press.

4.5 SYNTHÈSE TRANSVERSALE DES DÉFIS ET PERSPECTIVES

4.5.1 Les EDP paraboliques

La résolution des EDP de type parabolique pose des défis numériques et algorithmiques importants. Ces équations modélisent des phénomènes transitoires où la dynamique temporelle peut impliquer des **échelles de temps très courtes**. Pour capturer correctement ces évolutions rapides il est souvent nécessaire d'utiliser une **résolution fine dans le temps**. Les méthodes classiques, comme les schémas d'Euler explicites ou implicites, sont alors largement utilisées. Cependant, elles présentent des **limitations en termes de précision, de stabilité et de coût numérique**, surtout dans les régimes où la discrétisation spatiale est très fine ou avec un nombre de dimensions élevé. Ces considérations (incluant les notions de **stabilité conditionnelle, inconditionnelle, consistance et convergence**) sont détaillées dans le chapitre 5, dédié à l'analyse technique des méthodes numériques classiques pour les EDP⁶³.

4.5.2 Les EDP elliptiques

Les EDP elliptiques sont généralement résolues par des méthodes numériques, notamment :

- **Différences finies**⁶⁴.
- **Éléments finis** pour les domaines complexes⁶⁵.
- **Méthodes spectrales**, efficaces pour les problèmes avec conditions aux limites lisses⁶⁶.

Les défis majeurs incluent la gestion des **conditions aux limites complexes**, la résolution efficace en **haute dimension** et le **coût computationnel** croissant pour les simulations à grande échelle. De nouvelles approches hybrides, combinant **IA et quantique**, pourraient améliorer ces simulations en réduisant les coûts en temps de calcul.

4.5.3 Les EDP hyperboliques

La résolution des EDP hyperboliques pose plusieurs défis, notamment la **stabilité des méthodes numériques** et la nécessité d'utiliser des **maillages adaptatifs** pour capturer des détails fins sans exploser en coût de calcul. Les méthodes traditionnelles comme les **différences finies et éléments finis discontinus** (FEM, FVM) sont couramment utilisées, mais nécessitent des avancées en **accélération matérielle**.

Des approches récentes, comme les **algorithmes inspirés quantiques**, promettent de révolutionner ces simulations en réduisant le coût de résolution des systèmes hyperboliques à grande échelle⁶⁷. L'application des **PINNs (Physics-Informed Neural Networks)** aux équations de Navier-Stokes est une piste prometteuse pour la simulation en temps réel des flux d'air et de la dynamique des fluides⁶⁸.

⁶³ Strikwerda, J. C. (2004). **Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations**. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM). ISBN: 978-0898714571.

⁶⁴ Voir aussi Strikwerda, 2004

⁶⁵ Voir aussi Zienkiewicz, 2005

⁶⁶ Canuto, C. (2006). **Spectral Methods in Fluid Dynamics**. Springer-Verlag, Berlin. ISBN: 978-3540356419.

⁶⁷ Lloyd, S. (1996). **Universal Quantum Simulators**. *Science*, 273(5278), 1073–1078.

⁶⁸ Raissi, M. (2019). **Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations**. *Journal of Computational Physics*.

4.5.4 Les EDP dispersives

Les EDP dispersives et non linéaires sont difficiles à résoudre en raison de leur **comportement fortement non linéaire et multiscale**. Les méthodes numériques incluent :

- Les différences finies explicites pour des approches simplifiées.
- Les schémas pseudo-spectraux pour capturer les structures fines des ondes.
- Les réseaux de tenseurs et méthodes quantiques pour accélérer les calculs dans des systèmes de grande taille⁶⁹.

4.5.5 En résumé

Les EDP se classent selon leur structure mathématique et les phénomènes physiques qu'elles modélisent. Leur résolution numérique requiert des ressources variables en fonction de leur type, et chaque catégorie pose des défis computationnels spécifiques. Cette typologie est essentielle pour orienter les choix algorithmiques, optimiser les architectures de calcul et identifier les situations dans lesquelles de nouvelles approches comme le quantique ou les réseaux de tenseurs peuvent offrir un gain substantiel. Le tableau ci-dessous résume les principales caractéristiques liées aux ressources nécessaires et aux difficultés rencontrées dans leur résolution, ainsi que quelques exemples d'applications typiques.

Type d'EDP	Mémoire nécessaire	Temps de calcul	Difficultés spécifiques	Applications typiques
Elliptiques	Élevée (grandes matrices)	Moyenne	Grande matrice creuse à inverser, mal conditionnée ⁷⁰	Potentiel électrostatique, mécanique statique, champs stationnaires
Paraboliques	Moyenne à élevée	Très élevée (Δt petit)	Temps de simulation long, stabilité conditionnelle	Diffusion thermique, finance quantitative, réactions chimiques
Hyperboliques	Variable (selon schéma)	Élevée (résolution fine)	Schémas instables, oscillations numériques, traitement des discontinuités	Ondes sismiques, acoustique, mécanique des milieux continus
Non-linéaires	Variable (non prédictible)	Très élevée (itérations)	Problèmes de convergence, dépendance aux conditions initiales, comportements chaotiques	Turbulence, simulation quantique, physique des plasmas

Tableau 1 : Contraintes computationnelles selon le type d'EDP

⁶⁹ Boyd, J. P. (2001). **Chebyshev and Fourier Spectral Methods**. Dover.

⁷⁰ Grande matrice creuse souvent **mal conditionnée** ; le coût d'inversion dépend fortement du nombre de condition κ . Des **préconditionneurs** (ILU, multigrille, AMG, etc.) sont indispensables pour réduire le nombre d'itérations des solveurs.

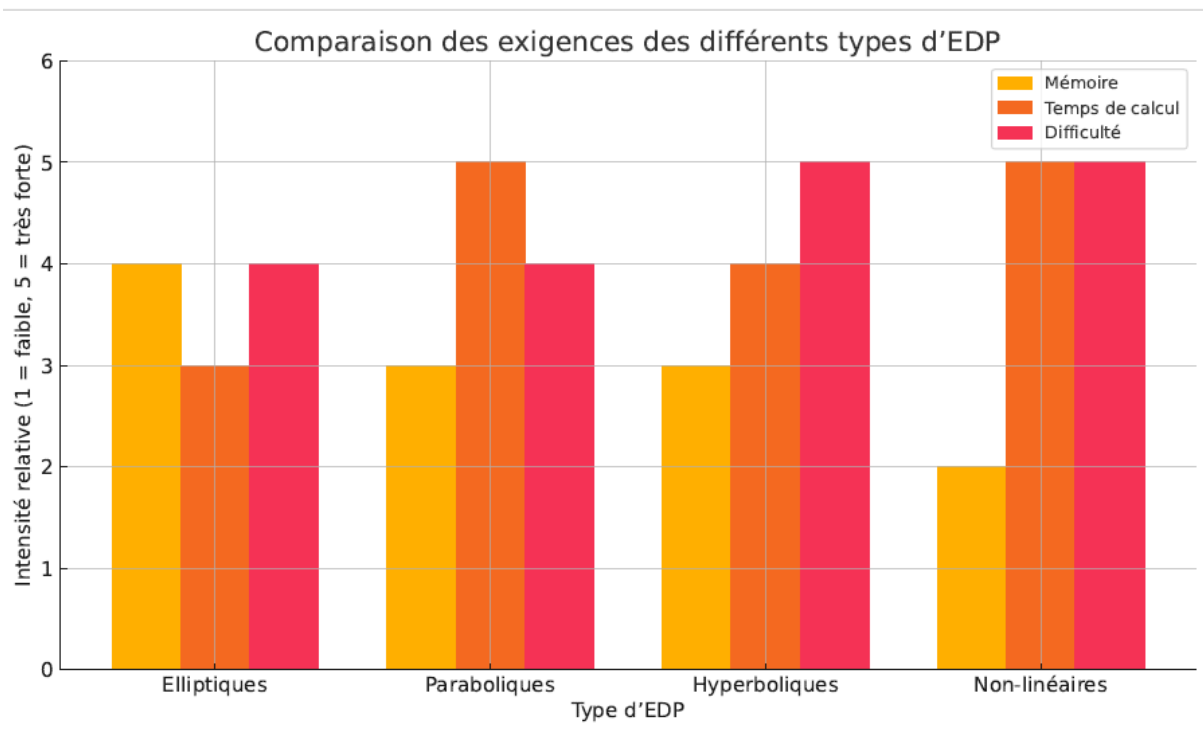


Figure 10 : Graphe comparatif illustrant les exigences relatives en mémoire, temps de calcul et difficulté pour différents types d'EDP.

Ce panorama met en lumière les cas critiques où les **approches classiques atteignent leurs limites**, en particulier dans les EDP non linéaires ou de très haute dimension. Cette classification souligne que le choix des méthodes numériques et des ressources de calcul dépend étroitement de la nature de l'EDP en jeu. Dans un contexte de calcul haute performance ou d'approches hybrides (quantique ou IA), cette typologie permet d'identifier les cas les plus critiques pour lesquels des alternatives aux méthodes classiques pourraient offrir un avantage décisif.

5. APPROCHES CLASSIQUES DE RESOLUTION DES EDP ET LEURS LIMITES

La résolution exacte des EDP n'est possible que dans un nombre très limité de cas, généralement associés à des géométries simples, des conditions aux limites idéalisées et des équations linéaires. Dans la majorité des situations industrielles et scientifiques, les EDP modélisent des systèmes complexes, non linéaires, dans des domaines géométriquement irréguliers. Pour cette raison, l'intégration de **méthodes d'approximation** est indispensable pour obtenir des solutions numériques utilisables. Ces méthodes permettent de transformer les EDP en systèmes algébriques ou en représentations discrètes exploitables sur des ordinateurs haute performance. Les méthodes d'approximation reposent sur une idée centrale : **projeter le problème continu (EDP) sur un espace fonctionnel discrétisé**.

5.1 METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION DES EDP ET LEURS LIMITES

La résolution numérique des équations aux dérivées partielles repose sur leur discrétisation, c'est-à-dire la transformation de ces équations continues en un système fini d'équations algébriques. Trois grandes familles de méthodes sont historiquement utilisées : **les différences finies (FDM)**, **les éléments finis (FEM)** et **les volumes finis (FVM)**. Chacune présente des avantages, des limites spécifiques, et s'adapte à différents types de problèmes et de contraintes géométriques, physiques ou numériques.

5.1.1 Méthode des différences finies (FDM)

La méthode des différences finies repose sur l'approximation des dérivées par des formules de différences sur une grille régulière. Elle suppose que le domaine est discrétisé en points nodaux équidistants et que la solution est représentée par ses valeurs en ces points. Par exemple :

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Cette méthode présente l'avantage d'être conceptuellement simple et particulièrement facile à mettre en œuvre. Elle est bien adaptée aux domaines géométriquement réguliers, typiquement des grilles cartésiennes, et permet une discrétisation explicite des dérivées. Son faible coût algorithmique et sa structure matricielle claire la rendent très attractive pour des simulations rapides, des démonstrateurs pédagogiques ou encore des résolutions itératives sur des architectures parallèles. Cette méthode est donc fréquemment utilisée dans des cas tels que la diffusion thermique dans des milieux homogènes, la propagation acoustique dans des tubes, ou encore pour des problèmes en dimension 1 ou 2 à géométrie simple (Smith, 1985).

Cependant, la FDM atteint rapidement ses limites dès que le problème sort du cadre régulier. Elle est peu adaptée aux géométries complexes ou aux domaines non structurés. Le traitement des conditions aux limites peut devenir difficile, surtout pour des conditions mixtes, non homogènes ou dépendant de la géométrie. De plus, elle est sujette à des restrictions de stabilité strictes, notamment dans les schémas explicites pour les équations paraboliques ou hyperboliques, où la condition de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) impose de très petits pas de temps. Enfin, l'extension à des problèmes non linéaires ou anisotropes peut nécessiter une formulation plus lourde et un raffinement de la grille qui augmente fortement les coûts en mémoire et en temps.

5.1.2 Méthode des éléments finis (FEM)

La méthode des éléments finis repose sur la **formulation faible** (ou variationnelle) des EDP. Elle consiste à multiplier l'équation par une fonction test v , à intégrer par parties, puis à approximer la solution dans un espace discret (souvent constitué de polynômes locaux sur des mailles) :

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx \quad \forall v \in V$$

où V est un espace de test (souvent H^1) et Ω le domaine.

La méthode des éléments finis constitue une approche mathématiquement plus élaborée, fondée sur une formulation variationnelle des équations. Elle offre une très grande flexibilité pour traiter des domaines complexes, des maillages irréguliers en deux ou trois dimensions, ainsi que des conditions aux limites variées. Elle s'appuie sur une base fonctionnelle locale, généralement polynomiale, permettant une approximation fine de la solution et une analyse rigoureuse de la convergence. La FEM est particulièrement performante pour des problèmes stationnaires ou faiblement transitoires, comme en mécanique des structures (déformations, contraintes), en électromagnétisme, ou dans des simulations biomédicales impliquant des interfaces complexes⁷¹.

En contrepartie, cette méthode présente une complexité mathématique et algorithmique importante. Elle nécessite la dérivation d'une formulation faible, l'assemblage de matrices globales, et souvent l'utilisation de solveurs linéaires ou non linéaires performants. Son implémentation demande une infrastructure logicielle robuste, notamment pour la génération de maillages, le traitement des intégrales numériques et l'adaptation du pas spatial. De plus, pour des problèmes fortement non linéaires, multiscales ou instationnaires, le coût computationnel croît rapidement, et les performances peuvent devenir un frein dans les environnements contraints ou en temps réel.

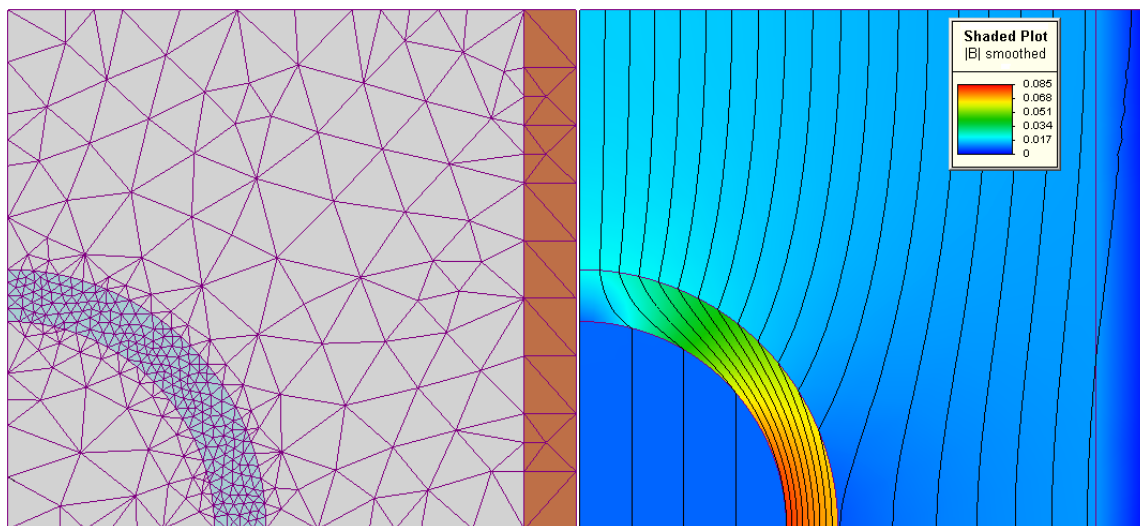


Figure 11 : Maillage utilisé et solution bidimensionnelle d'une équation magnétostatique obtenue par éléments finis (les lignes donnent la direction du champ et la couleur son intensité)⁷².

⁷¹ Brenner, S. C. (2008). *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. Springer.

⁷² Par I, Zureks, CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=2358762>

5.1.3 Méthode des volumes finis (FVM)

La méthode des volumes finis repose sur la conservation des quantités physiques. L'EDP est intégrée sur un **volume de contrôle** V_i et le théorème de la divergence est utilisé pour convertir les intégrales volumiques en flux surfaciques :

$$\int_{V_i} \frac{\partial u}{\partial t} dV + \int_{\partial V_i} \mathbf{F}(u) \cdot \mathbf{n} dS = 0$$

où $F(u)$ est le flux associé (quantité transportée) et n la normale à la surface.

La méthode des volumes finis se distingue par son approche conservatrice, directement inspirée des principes physiques de conservation (masse, énergie, quantité de mouvement). Elle est fondée sur l'intégration des équations sur des volumes de contrôle autour des mailles, ce qui garantit une conservation locale exacte, quel que soit le raffinement du maillage. Cela la rend particulièrement robuste pour les équations hyperboliques ou de type transport, où des discontinuités ou des ondes de choc peuvent apparaître (Versteeg, 2007). Très utilisée dans les domaines de la mécanique des fluides, de la thermodynamique et de la combustion, elle constitue le cœur de nombreux solveurs industriels tels qu'**OpenFOAM, Ansys Fluent ou Star-CCM+**.

Néanmoins, la FVM est souvent limitée à des ordres de précision faibles, en général du premier ou du second ordre, ce qui peut poser un problème dans des cas où une grande précision locale est requise. Le traitement des gradients forts ou des discontinuités impose souvent le recours à des techniques comme les limiteurs de pente, augmentant la complexité algorithmique. Par ailleurs, cette méthode est moins adaptée aux équations elliptiques stationnaires ou aux régimes linéaires précis, où les méthodes par éléments finis conservent un net avantage en termes de précision et de contrôle des erreurs. Elle peut également souffrir d'une rigidité dans l'implémentation de certains termes sources complexes ou de couplages multiphysiques avancés.

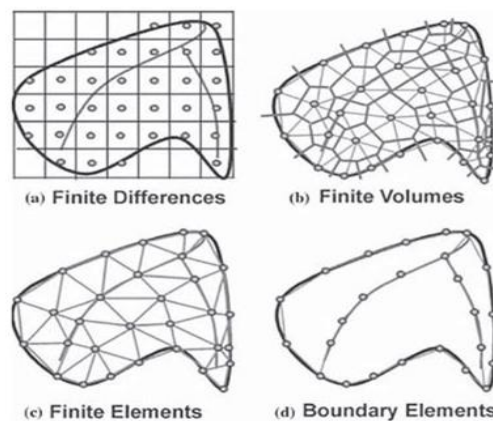


Figure 12 : Différence entre la FDM, la FEM et la FVM⁷³.

⁷³ https://ebrary.net/215164/environment/finite_differences

5.1.4 Perspectives et limites globales

Méthode	Géométrie	Conservation	Complexité mathématique	Précision	Applications typiques
FDM	Régulière	Non garantie	Faible	Moyenne	Diffusion simple, prototypage rapide
FEM	Complexe	Non garantie	Élevée	Élevée	Structures, électromagnétisme, bio-ingénierie
FVM	Moyennement flexible	Garantie	Moyenne	Moyenne	Fluides, énergie, simulations multiphysiques

Tableau 2 : Récapitulatif des différentes méthodes

Ces méthodes classiques atteignent leurs **limites dès que la dimension du problème, la complexité géométrique ou la non-linéarité croissent fortement**. En particulier :

- La **malédiction de la dimension** rend les solveurs inefficaces pour des EDP sur des espaces à plus de 4 ou 5 dimensions (finance, dynamique moléculaire).
- La **résolution adaptative** (multi-échelle, maillages adaptatifs) devient gourmande en calcul.
- Les **EDP stochastiques** et plus généralement la quantification des incertitudes introduisent des couches de complexité supplémentaires (ex. méthodes de collocation stochastique).

Cela justifie l'émergence de nouvelles approches explorées dans les sections suivantes : **quantique, réseaux de tenseurs**, méthodes d'apprentissage ou modèles réduits.

5.2 METHODES SPECTRALES ET PSEUDO-SPECTRALES

Les méthodes spectrales approximent la solution par des séries de fonctions globales (typiquement des polynômes de Chebyshev ou des fonctions trigonométriques) :

$$u(x, t) \approx \sum_{k=0}^N a_k(t) \phi_k(x)$$

où les $\phi_k(x)$ sont les fonctions de base globales et les coefficients $a_k(t)$ sont calculés en projetant l'équation sur l'espace engendré par ces fonctions. Cette approche permet d'atteindre une précision spectrale, c'est-à-dire une erreur décroissante plus rapidement que toute puissance inverse de N , dès lors que la solution est suffisamment régulière.

L'un des principaux atouts des méthodes spectrales est donc leur **très grande précision pour un nombre réduit de degrés de liberté**, à condition que la solution soit lisse. Elles sont donc particulièrement bien adaptées aux problèmes déterministes, aux régimes linéaires, et aux domaines simples (typiquement, intervalles ou domaines périodiques). Lorsqu'elles sont utilisées dans le cadre de géométries périodiques, les méthodes **pseudo-spectrales** permettent d'accélérer significativement les calculs grâce à l'utilisation de la transformée de Fourier rapide (FFT). Cette dernière permet une discrétisation extrêmement fine des termes différentiels, tout en gardant un coût computationnel modéré.

C'est dans ce cadre que les méthodes pseudo-spectrales trouvent de nombreuses applications dans la **simulation de phénomènes dynamiques complexes** comme la **turbulence** en mécanique des fluides, la **propagation d'ondes non linéaires**, ou encore dans les **modèles réduits** de la dynamique climatique

et de la physique des plasmas. En sciences fondamentales, elles sont aussi utilisées pour résoudre certaines équations intégrables ou pour des problèmes spectraux en mécanique quantique.

Cependant, ces méthodes présentent plusieurs limites notables. Tout d'abord, leur implémentation nécessite une **connaissance précise des propriétés analytiques de la solution**, notamment sa régularité et ses symétries. En présence de discontinuités (comme les chocs ou les interfaces brusques), les méthodes spectrales sont sujettes à des phénomènes de **Gibbs**, introduisant des oscillations parasites difficilement maîtrisables. De plus, leur efficacité repose sur des domaines **géométriquement simples** : intervalles réguliers, domaines rectangulaires ou périodiques. L'adaptation aux géométries complexes ou multi-domaines impose des extensions non triviales, comme les méthodes spectrales élémentaires ou les approches par décomposition de domaines.

Enfin, les matrices associées aux opérateurs différentiels dans la base spectrale peuvent être denses et mal conditionnées, rendant la résolution numérique plus délicate, surtout en grande dimension ou pour des équations fortement non linéaires. Cela nécessite l'utilisation de préconditionneurs efficaces et de schémas spécifiques pour conserver la stabilité numérique.

En résumé, les méthodes spectrales et pseudo-spectrales se distinguent par leur **précision inégalée** pour les solutions régulières sur des domaines simples, mais leur **utilisation reste conditionnée** par la nature du problème, la géométrie du domaine et la structure des équations. Elles trouvent leur place dans des applications de pointe en physique computationnelle mais requièrent une expertise mathématique et algorithmique avancée pour être déployées efficacement.

5.3 METHODES INTEGRALES ET TECHNIQUES DE GREEN

5.3.1 Principes des méthodes intégrales

Les **méthodes intégrales** reposent sur la reformulation d'un problème aux dérivées partielles (EDP) en une **équation intégrale**, en exploitant la **fonction de Green** associée à l'opérateur différentiel et au domaine. Pour une EDP linéaire du type :

$$\mathcal{L}u(x) = f(x) \quad \text{dans } \Omega$$

avec condition aux limites sur $\partial\Omega$, la solution peut être écrite formellement sous la forme :

$$u(x) = \int_{\Omega} G(x,y)f(y) \, dy + \text{termes de bord}$$

où $G(x,y)$ est la **fonction de Green**, solution fondamentale de $\mathcal{L}G = \delta$.

Cette reformulation transforme un problème différentiel en un **problème d'intégrale volumique et surfacique**, souvent avantageux pour des milieux homogènes, infinis ou avec symétries.

5.3.2 Domaines d'application privilégiés

Les méthodes intégrales sont particulièrement adaptées aux problèmes suivants :

- **Équation de Poisson** : modélisation de potentiels (champ électrique, gravité, mécanique des milieux continus),
- **Équation de Helmholtz** et de **Maxwell** : propagation électromagnétique, acoustique, optique,
- **Domaines non bornés** : elles permettent une gestion naturelle de l'infini, contrairement aux méthodes classiques de discrétisation volumique,

- **Problèmes avec discontinuités** : en ne maillant que le bord du domaine (Boundary Element Methods), elles réduisent les dimensions du problème.

5.3.3 Algorithmes multipolaires rapides (FMM)

L'un des **défis majeurs** des formulations intégrales est le coût du calcul du terme intégral : une double intégrale sur le domaine entraîne une **complexité quadratique** $O(N^2)$ pour N points sources. Ce coût est prohibitif pour les applications à grande échelle.

Les **Fast Multipole Methods (FMM)**, introduites par Greengard et Rokhlin⁷⁴, ont révolutionné ce domaine en réduisant ce coût à $O(N)$ ou $O(N \log N)$ selon la version.

Elles reposent sur trois idées clés :

- **Décomposition hiérarchique de l'espace** (arborescence du domaine en boîtes ou sphères),
- **Développement multipolaire** des interactions lointaines (approximations analytiques),
- **Troncature adaptative** en fonction de la distance et de la précision désirée.

Ces méthodes sont **particulièrement performantes** pour les problèmes de type : Électrostatique / gravité (équation de Poisson), Propagation d'ondes (Helmholtz, Maxwell), Simulations en physique des plasmas ou dynamique moléculaire.

Le FMM est considéré comme l'un des **10 algorithmes les plus importants du XXe siècle**, selon le classement SIAM (2000), aux côtés du **QR, FFT, Simplexe, Métropolis** ou des **méthodes multigrilles**.

5.3.4 Défis numériques et extension

Malgré leur efficacité, ces méthodes présentent certaines **limitations techniques** :

- Difficulté à gérer des **géométries complexes** ou des milieux hétérogènes (non isotropes),
- Extension aux **problèmes non linéaires** peu naturelle,
- Intégration dans les environnements multiphysiques encore peu généralisée.

Cependant, elles font aujourd'hui l'objet de **développements hybrides**, combinées à des méthodes d'apprentissage (approximation de fonctions de Green par réseaux de neurones) ou des approches quantiques en phase de recherche.

5.4 METHODES AVANCEES : ADAPTATIVES, HYBRIDES ET MULTIGRILLES

Face à la complexité croissante des systèmes modélisés par les équations aux dérivées partielles (EDP), les méthodes classiques atteignent leurs limites en termes de précision, de temps de calcul ou de capacité à gérer des hétérogénéités locales. Pour surmonter ces difficultés, plusieurs approches numériques avancées ont été développées : méthodes adaptatives, multigrilles et hybrides. Ces techniques sont aujourd'hui centrales dans les solveurs hautes performances, tant dans la recherche que dans l'industrie.

⁷⁴ Greengard, L., & Rokhlin, V. (1987). "A fast algorithm for particle simulations." *Journal of Computational Physics*, 73(2), 325–348.

5.4.1 Méthodes adaptatives (AMR – Adaptive Mesh Refinement)

Les méthodes adaptatives reposent sur le principe d'un **raffinement local du maillage** en fonction des caractéristiques locales de la solution. L'objectif est d'augmenter la densité des points de calcul dans les zones où la solution varie rapidement (discontinuités, gradients forts, fronts d'ondes), tout en la maintenant plus grossière ailleurs pour **optimiser les ressources**.

L'approche adaptative est généralement guidée par des indicateurs d'erreur (par exemple, des estimateurs a posteriori) qui permettent de détecter les régions nécessitant un raffinement ou une coarsening du maillage. Ce type de méthode est particulièrement utile pour les **problèmes non stationnaires** avec formation de structures fines (chocs, couches limites, interfaces mobiles).

La technique de Berger et Oliger⁷⁵, souvent citée comme fondatrice dans ce domaine, a été largement appliquée dans les codes de mécanique des fluides compressibles, d'astrophysique ou d'électromagnétisme. Elle permet une **réduction drastique du coût de calcul** à précision constante par rapport aux méthodes uniformes.

5.4.2 Méthodes multigrilles

Les méthodes multigrilles (ou *multilevel*) sont conçues pour **accélérer la convergence des solveurs itératifs**, en particulier pour les EDP elliptiques⁷⁶ ou les systèmes issus de la discrétisation implicite. Le principe repose sur une hiérarchie de grilles à différentes résolutions. À chaque niveau, les erreurs de la solution approximative sont corrigées par des transferts d'information vers des grilles plus grossières ou plus fines. Cette hiérarchie permet de **traiter efficacement les composantes haute et basse fréquence de l'erreur**, un point faible des méthodes itératives classiques comme Gauss-Seidel ou Jacobi. L'efficacité des méthodes multigrilles est démontrée théoriquement : sous certaines hypothèses, elles convergent en un nombre d'itérations indépendant de la taille du problème.

Les multigrilles sont devenues un composant standard des solveurs numériques dans les logiciels de simulation structurale, en thermique et en géophysique. Leur extension à des grilles non structurées ou à des géométries complexes nécessite cependant des stratégies spécifiques de prolongation et de restriction inter-niveaux.

5.4.3 Méthodes hybrides

Les méthodes hybrides visent à **combiner plusieurs schémas numériques** afin de tirer parti des avantages de chacun. On peut ainsi intégrer la robustesse des éléments finis dans des zones complexes avec la précision spectrale dans des sous-domaines réguliers, ou encore combiner éléments finis et volumes finis pour assurer à la fois **conservation locale** et **flexibilité géométrique**.

Ces approches sont particulièrement pertinentes pour les **problèmes multiphysiques ou multirégimes**, où différentes équations régissent des sous-domaines (par exemple, mécanique des structures couplées à des écoulements fluides, ou interactions fluide-structure). Les méthodes hybrides permettent également d'intégrer des schémas implicites et explicites dans une même simulation (*IMEX schemes*), optimisant le compromis entre précision et stabilité. Leur mise en œuvre requiert une **gestion fine des interfaces** entre les sous-domaines et des techniques d'interpolation robustes. Elles trouvent aujourd'hui de nombreuses applications industrielles, notamment dans l'automobile, l'aéronautique, le génie civil ou la simulation biomédicale. Les travaux de Patera⁷⁷ ont structuré cette approche dans le cadre de la **réduction de modèle** et du calcul paramétré.

⁷⁵Berger, M. J. (1984). **Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Partial Differential Equations**. *J. Comput. Phys.*

⁷⁶Trottenberg, U. (2001). **Multigrid**. *Academic Press*.

⁷⁷Patera, A. T. (2007). **Reduced Basis Approximation and A Posteriori Error Estimation for Parametrized PDEs**. *MIT*.

5.5 OUVERTURE : VERS L'INTEGRATION DANS LES ARCHITECTURES HPC

L'intégration des méthodes numériques de résolution d'EDP dans des architectures de calcul haute performance (HPC) est aujourd'hui une nécessité dans de nombreux domaines industriels et scientifiques. Les méthodes évoquées précédemment (éléments finis, volumes finis, méthodes spectrales, adaptatives ou hybrides) sont mises en œuvre dans des logiciels commerciaux largement diffusés — tels que **COMSOL Multiphysics**, **ANSYS** ou **Abaqus**, fondés sur des variantes avancées de la **méthode des éléments finis** — ainsi que dans des codes open source de référence, comme **FreeFem++** et **FEniCS** (éléments finis) ou **OpenFOAM** (volumes finis).

Ces outils permettent de simuler avec précision des phénomènes physiques complexes : le comportement de composants mécaniques et thermiques dans l'automobile, l'optimisation aérodynamique de structures en aéronautique, la propagation d'ondes électromagnétiques dans des dispositifs de télécommunications, ou encore le transfert thermique et électrique dans des circuits intégrés.

5.5.1 L'enjeu du calcul haute performance (HPC)

Dans les cas réels, les simulations peuvent impliquer **des centaines de millions à plusieurs milliards de degrés de liberté** (DOF), ce qui impose une exécution sur des supercalculateurs massivement parallèles. Plusieurs défis majeurs émergent alors :

- **Scalabilité** des méthodes : les algorithmes doivent rester efficaces lorsqu'ils sont déployés sur un grand nombre de processeurs ;
- **Parallélisation efficace** : la résolution numérique doit tirer parti des architectures hétérogènes actuelles (multi-cœurs, GPU, mémoire distribuée) ;
- **Simulation en temps réel ou quasi-réel** : exigence incontournable pour les **systèmes embarqués**, les **jumeaux numériques** ou les **boucles de contrôle en ligne** ;
- **Optimisation algorithmique et logicielle** : le développement de méthodes adaptées aux architectures HPC constitue aujourd'hui un champ de recherche particulièrement actif, à l'interface entre calcul numérique et informatique parallèle⁷⁸.

5.5.2 Pourquoi ne pas résoudre les EDP analytiquement ?

Dans la pratique, les EDP modélisant les phénomènes physiques sont rarement résolubles analytiquement. Plusieurs obstacles s'y opposent :

- **Géométries complexes**, souvent tridimensionnelles, non régulières ;
- **Conditions aux limites mixtes**, parfois non linéaires ou dynamiques ;
- **Comportement non linéaire des matériaux**, couplage multiphysique ;
- **Solutions non régulières**, voire discontinues.

Pour toutes ces raisons, les ingénieurs et chercheurs ont recours à des **méthodes numériques**, consistant à discrétiser le domaine spatial (et parfois temporel) pour transformer l'EDP en un système algébrique ou différentiel plus simple à résoudre par ordinateur.

Une stratégie courante consiste à **découpler les dimensions spatiale et temporelle** :

⁷⁸ Keyes, D. E., (2013). **Multiphysics simulations: Challenges and opportunities**. *The International Journal of High Performance Computing Applications*.

1. Dans un premier temps, discrétiser l'espace, ce qui transforme l'EDP initiale en un **système d'équations différentielles ordinaires (EDO)** dépendant du temps.
2. Dans un second temps, ces EDO sont intégrées numériquement grâce à des **schémas temporels**, qui peuvent être de type **explicite** ou **implicite** selon les besoins en précision et stabilité.

Schémas explicites : la solution à l'instant suivant est calculée directement à partir de la solution actuelle. Ces schémas sont simples, rapides à implémenter et peu coûteux par pas de temps, mais **fortement contraints par la stabilité**. Par exemple, pour les équations de transport ou d'ondes, le **critère CFL (Courant-Friedrichs-Lewy)** impose un pas de temps proportionnel à la taille du maillage. Si celui-ci est fin, le temps de calcul total peut devenir prohibitif.

Schémas implicites : la solution à l'instant suivant dépend d'elle-même, ce qui nécessite la **résolution d'un système linéaire (ou non linéaire)** à chaque pas de temps. Ils sont **plus stables**, notamment pour des équations diffuses ou raides (stiff equations), et permettent des pas de temps plus grands. En contrepartie, ils sont plus complexes à implémenter et **plus coûteux par itération**.

Le choix entre schémas explicites et implicites dépend donc d'un compromis entre **stabilité, précision, et coût**.

5.5.3 Comparaison des méthodes numériques

Le choix de la méthode de discrétisation dépend de plusieurs critères essentiels :

- **Précision** : Capacité à approcher la solution réelle pour un maillage donné. Dépend de l'ordre du schéma.
- **Stabilité** : Garantie de ne pas produire de solutions divergentes selon les conditions (régime, pas de temps).
- **Coût numérique** : Temps de calcul, consommation mémoire, complexité d'implémentation.

Le tableau ci-dessous synthétise ces caractéristiques pour les méthodes les plus courantes.

Méthode	Précision	Stabilité	Coût relatif	Adaptation aux problèmes	Remarques
FDM	Ordre 1-2 selon le schéma	Conditionnelle (CFL)	Faible	Domaines réguliers	Sensible à la géométrie et aux bords
FEM	Haute, localement adaptative	Bonne, même sur maillage irrégulier	Moyen à élevé	Géométries complexes, problèmes elliptiques	Large flexibilité
FVM	Moyenne à bonne, conservationnelle	Bonne	Moyen	Mécanique des fluides, thermique	Idéal pour lois de conservation
Spectrale	Très haute sur solution lisse	Moins tolérante aux discontinuités	Élevé	Problèmes réguliers, périodiques	Convergence exponentielle
AMR	Localement très précise	Bonne si bien contrôlée	Variable	Zones avec front ou gradient	Optimise les ressources
Multigrille	Agit au niveau du solveur	Excellente pour elliptique	Faible à moyen	Grands systèmes linéaires	Accélère la convergence

Tableau 3 : Caractéristiques des différentes méthodes numériques

Chaque méthode présente des compromis différents : les méthodes spectrales sont très précises mais sensibles, les volumes finis très robustes mais moins souples. Le choix se fait donc selon le contexte physique, les régularités de la solution et les contraintes informatiques imposées.

5.6 GUIDE DE CHOIX DES METHODES SELON LA NATURE DE L'EDP

Pour orienter le choix d'une méthode numérique adaptée, il est essentiel de tenir compte de la nature mathématique de l'équation aux dérivées partielles (EDP) à résoudre. Les EDP se classent classiquement en plusieurs types – paraboliques, hyperboliques, elliptiques, ou mixtes – selon leur comportement temporel et spatial. Chaque classe implique des contraintes spécifiques en matière de stabilité numérique, de conditions aux limites et de stratégies de discrétisation. Le tableau ci-dessous propose un guide synthétique de correspondance entre les types d'EDP, les méthodes recommandées, les conditions de stabilité associées et les solveurs numériques les plus courants.

Type d'EDP	Méthode recommandée	Contraintes de stabilité	Solveur typique
Parabolique (diffusion)	Crank-Nicolson, implicite, FEM/FDM		LU, CG, Multigrille
Hyperbolique (ondes)	Lax-Wendroff, Leapfrog, TVD/ENO	CFL	Schémas explicites, RK
Elliptique (statique)	FEM, FVM, Multigrille	Pas de contrainte temporelle	GMRES, Multigrille
Advection-Diffusion	IMEX, Schémas hybrides	Dépend des deux termes	Solveurs implicites hybrides
Multidimensionnelle	ADI, splitting, FEM adaptatif	Stabilité croisée : Δt contraint par chaque dimension	Multigrille, Domain decomposition

Tableau 4 : Récapitulatif des méthodes classiques en fonction des EDP

Intégration temporelle : Un concept central dans le choix du schéma temporel est celui de **raideur**. Un système est dit raide lorsqu'il comporte des composantes qui évoluent à des vitesses très différentes : certaines dynamiques sont très rapides, d'autres très lentes. Cette disparité d'échelles temporelles contraint fortement les schémas explicites qui doivent adopter un pas de temps suffisamment petit pour rester stables vis-à-vis des composantes rapides, au risque de rendre la simulation inutilement coûteuse. Les schémas implicites ou hybrides (IMEX) permettent de lever cette contrainte en stabilisant le calcul même avec des pas de temps plus grands.

La discrétisation temporelle intervient une fois la résolution spatiale effectuée. Les méthodes classiques incluent les schémas de Runge-Kutta (notamment RK4), Crank-Nicolson, Euler explicite ou implicite, et des schémas multi-pas. Le choix du schéma dépend de la raideur du système, du degré de précision recherché et des contraintes de stabilité numérique.

Schéma de Runge-Kutta d'ordre 4 (RK4) :

On définit successivement :

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(t_n, u_n) \\
 k_2 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{h}{2}k_1\right) \\
 k_3 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, u_n + \frac{h}{2}k_2\right) \\
 k_4 &= f(t_n + h, u_n + hk_3)
 \end{aligned}$$

L'approximation de la solution au pas suivant est donnée par :

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

où h est le pas de discrétisation, t_n est l'instant courant, u_n est la valeur de l'inconnue à t_n . Chaque k_i correspond à une estimation intermédiaire de la pente. La solution u_{n+1} est calculée comme une combinaison pondérée de ces pentes.

Schémas de discrétisation alternatifs : Si le schéma de Runge-Kutta, en particulier dans sa version d'ordre 4 (RK4), est largement utilisé pour sa simplicité et sa précision dans des contextes non raides, il n'est pas universellement optimal. De nombreux schémas temporels ont été développés pour répondre à différents besoins en termes de stabilité, de précision ou d'efficacité en contexte raide ou multidimensionnel. Le tableau suivant résume leurs caractéristiques principales.

Nom du schéma	Type	Description	Avantages	Inconvénients	Référence
Euler explicite / implicite	1er ordre	$u_{n+1} = u_n + \Delta t \cdot f(u_n, t_n)$	Très simple, rapide à implémenter	Faible précision, instable si Δt trop grand	Ascher et al., 1995 ⁷⁹
Crank–Nicolson	Implicite, 2e ordre	Moyenne entre Euler explicite et implicite	Stable, précis pour diffusion	Oscillations possibles si solution raide ou non régulière	Crank & Nicolson, 1947 ⁸⁰
Adams–Bashforth / Moulton	Multi-pas explicite / implicite	Utilise plusieurs étapes précédentes	Très efficace à long terme	Moins robuste à l'initialisation, dépend du passé	Butcher, 2003 ⁸¹
Schémas semi-implicites (IMEX)	Hybride	Explicite sur certains termes (advection), implicite sur d'autres (diffusion)	Bon compromis coût / stabilité	Implémentation plus complexe	Ascher et al., 1997 ⁸²
Lax–Wendroff / Leapfrog	Centré, 2e ordre	Conçus pour les EDP hyperboliques	Bonne précision en propagation d'ondes	Peu robustes avec diffusion ou discontinuités	LeVeque, 2002 ⁸³
TVD / ENO / WENO	Non linéaires, 1D/2D	Conservent la variation totale, limitent les oscillations	Efficaces en présence de chocs ou fronts	Coût élevé, mise en œuvre technique	Shu & Osher, 1988 ⁸⁴ ; Harten, 1983 ⁸⁵
ADI (Alternating Direction Implicit)	Implicite, multidimension	Résout implicitement une direction à la fois (ex : x puis y)	Réduction du coût en 2D/3D, stable pour diffusion	Moins précis si couplage fort entre dimensions	Peaceman & Rachford, 1955 ⁸⁶
Splitting directionnel (autres)	2D, 3D	Décomposition du problème par directions ou opérateurs	Réduction de complexité sur systèmes complexes	Approximations supplémentaires, erreurs d'interaction	Marchuk, 1990 ⁸⁷

⁷⁹ Ascher, U. M. (1995). **Implicit-explicit methods for time-dependent PDEs**. *SIAM Journal on Numerical Analysis*.

⁸⁰ Crank, J., & Nicolson, P. (1947). **A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type**. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*.

⁸¹ Butcher, J. C. (2003). **Numerical Methods for Ordinary Differential Equations**. Wiley.

⁸² Ascher, U. (1997). **Implicit-explicit Runge–Kutta methods for time-dependent partial differential equations**. *Applied Numerical Mathematics*, 25(2-3), 151–167.

⁸³ LeVeque, R. J. (2002). **Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems**. Cambridge University Press.

⁸⁴ Shu, C.-W., & Osher, S. (1988). **Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes**. *Journal of Computational Physics*.

⁸⁵ Harten, A. (1983). **High resolution schemes for hyperbolic conservation laws**. *Journal of Computational Physics*.

⁸⁶ Peaceman, D. W., & Rachford, H. H. (1955). **The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations**. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*.

⁸⁷ Marchuk, G. I. (1990). **Splitting and alternating direction methods**. Springer.

Tableau 5 : Schémas de discrétisation

5.6.1 Exemples de contraintes de stabilité

La stabilité des schémas numériques est une condition nécessaire pour obtenir des solutions fiables dans le temps. Elle impose des contraintes sur le pas de temps admissible, en fonction du type d'EDP et du schéma utilisé. Les schémas explicites, par exemple, sont soumis à des limites strictes qui peuvent rendre la simulation inefficace si le pas de maillage est trop fin. À l'inverse, les schémas implicites sont plus robustes mais nécessitent de résoudre un système à chaque pas, ce qui alourdit le calcul.

- Dans le cas de l'**équation de la chaleur en une dimension**, résolue par un schéma explicite de différences finies, la condition de stabilité lie directement la taille du pas de temps à celle du maillage spatial : plus le maillage est fin, plus le pas de temps doit être réduit.
- Pour les **problèmes hyperboliques**, tels que l'équation des ondes ou l'advection, la contrainte de stabilité impose que la propagation numérique respecte la vitesse physique du signal. Autrement dit, l'information ne peut pas se déplacer plus vite dans le schéma que dans le phénomène réel.
- Dans les **cas multidimensionnels**, la condition de stabilité devient encore plus restrictive, car elle combine les pas de discrétisation dans chaque direction. Ainsi, plus la dimension du problème augmente, plus la contrainte sur le pas de temps se renforce.

Ces contraintes, regroupées sous le nom de **conditions de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL)**, signifient que les schémas explicites peuvent rapidement devenir impraticables si le maillage est raffiné. Les schémas implicites permettent de contourner ces limitations mais nécessitent la résolution de systèmes d'équations complexes à chaque pas de temps, ce qui accroît considérablement le coût de calcul.

Bonnes pratiques et aspects souvent négligés :

Il est important de distinguer **stabilité numérique et cohérence physique** : une solution peut être mathématiquement stable tout en étant physiquement non plausible (ex. diffusion excessive, violation de conservation).

En présence de discontinuités, les schémas classiques (centrés, Runge-Kutta) peuvent produire des oscillations non physiques (effet Gibbs), que l'on traite avec des schémas TVD, ENO ou WENO.

Un maillage non uniforme impose une adaptation locale du pas de temps pour éviter une instabilité locale, en particulier dans les schémas explicites (AMR + schéma adaptatif en temps).

Stabilité des solveurs linéaires : Même si le schéma global est stable, le système linéaire qu'il génère peut-être mal conditionné, ralentissant la convergence ou amplifiant les erreurs d'arrondi : des techniques comme le préconditionnement ou les méthodes multigrilles sont alors essentielles.

Stabilités pour EDP couplées : Dans les systèmes multiphysiques (ex. thermomécanique, électrohydraulique), chaque équation peut avoir des échelles temporelles différentes : risque de raideur et d'instabilité globale sans schéma adapté. La gestion de plusieurs échelles temporelles impose des schémas d'intégration spécifiques : schémas semi-implicites, partitionnement en sous-modèles ou couplages asynchrones.

5.6.2 Complexité et limitations

Limites en temps de calcul et précision :

La résolution numérique des EDP repose sur la discrétisation de l'espace et du temps, via des méthodes comme les différences finies, éléments finis ou volumes finis. Le coût en temps de calcul croît

généralement comme $\mathcal{O}(N^p)$, avec N le nombre de degrés de liberté et $p \geq 2$ selon la méthode⁸⁸. Cette complexité est aggravée lorsqu'on ajoute des dimensions spatiales, des non-linéarités ou des couplages multiphysiques.

Comme vu à la section précédente, les méthodes numériques introduisent une erreur de troncature dépendante de la maille h : pour les schémas d'ordre k , l'erreur typique est $\mathcal{O}(h^k)$. Cela impose un raffinement coûteux de la grille pour atteindre une précision acceptable, en particulier dans les régimes multi-échelles⁸⁹. En mécanique des fluides, par exemple, les solutions turbulentes nécessitent des résolutions très fines pour capturer les structures instables⁹⁰.

Explosion combinatoire des degrés de liberté :

Chaque dimension supplémentaire multiplie exponentiellement la taille des maillages nécessaires. Pour une grille uniforme de résolution n par dimension dans un espace d – *dimensionnel*, on a $N = n^d$ points. Cela rend les problèmes en dimension $d \geq 4$ rapidement inaccessibles aux approches classiques⁹¹.

Difficultés dans le traitement des hautes dimensions :

Les EDP en dimensions supérieures apparaissent fréquemment dans la physique quantique (espace des phases), en finance (modèles de portefeuille multi-actifs), ou en biologie (modélisation de populations structurées). Ces problèmes souffrent de la "malédiction de la dimension" qui rend les méthodes traditionnelles inefficaces⁹². Des stratégies comme la décomposition de domaine, la réduction de modèle (POD, SVD) ou les réseaux de tenseurs sont explorées pour contourner ces limites.

Contraintes liées à la complexité et aux ressources informatiques :

L'accès aux supercalculateurs est limité et les simulations massivement parallèles nécessitent des architectures optimisées. Par ailleurs, l'empreinte énergétique des calculs devient un facteur critique, notamment dans les simulations environnementales ou les jumeaux numériques industriels⁹³. Des approches hybrides, combinant IA, HPC et méthodes quantiques, sont en cours d'exploration.

5.6.3 Bilan des limites : temps de calcul, précision, complexité dimensionnelle

Les EDP posent donc des défis importants lorsqu'elles sont résolues numériquement. Cette section présente, sous forme de tableaux comparatifs, une synthèse structurée des principales limitations des méthodes classiques. L'objectif est d'offrir une vue transversale des compromis inhérents aux approches traditionnelles pour mieux situer l'apport potentiel des méthodes émergentes par la suite.

⁸⁸ Trefethen, L. N. (2000). *Spectral Methods in MATLAB*. Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM).

⁸⁹ Fornberg, B. (1998). *A Practical Guide to Pseudospectral Methods*. Cambridge University Press.

⁹⁰ Pope, S. B. (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge University Press.

⁹¹ Voir aussi Bellman, 1957

⁹² Bungartz, H. J. (2004). *Sparse grids*. *Acta Numerica*.

⁹³ Balaji, V. (2017). *The Impact of HPC on Climate Modeling*. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*.

Problème	Conséquence principale	Approches alternatives explorées
Temps de calcul élevé	Simulations longues ou impossibles	HPC, multigrid, solveurs itératifs avancés
Faible précision	Instabilité, non-convergence	Adaptativité, raffinement adaptatif
Haute dimension	Explosion mémoire et temps	Modèles réduits, réseaux de tenseurs
Non-linéarités complexes	Difficulté à simuler (chocs, bifurcations)	Apprentissage d'opérateurs (DeepONet ⁹⁴ , PINNs ⁹⁵), approches variationnelles exploratoires (VQE ⁹⁶)
Couplage multi-physique	Problèmes mal posés, mal conditionnés	Solveurs multiphysiques intégrés

Tableau 6 : Limitations des approches classiques

Problème	Description	Impact principal	Références clés
Temps de calcul	Complexité en $\mathcal{O}(N^3)$ pour certaines méthodes directes	Inadapté pour très grandes tailles	Saad, 2003 ⁹⁷ ; Trefethen & Bau, 1996 ⁹⁸
Précision	Erreurs d'approximation dues au maillage (troncature, interpolation)	Biais dans les résultats	LeVeque, 2007
Hautes dimensions	Explosion du nombre de points $N = n^d$	Intractable au-delà de $d > 5d$	Bellman, 1957 ("curse of dimensionality")
Conditions aux limites complexes	Difficiles à intégrer dans les méthodes standards (ex : interfaces mobiles)	Instabilité numérique	Quarteroni & Valli, 2008 ⁹⁹
Stabilité	Schéma explicite : condition CFL $\Delta t < C\Delta x^2$	Nécessite des pas de temps très petits	Courant et al., 1928

Tableau 7 : Limites fondamentales dans la résolution numérique

Méthode de discrétisation	Dimension	Taille du maillage	Mémoire requise (approximative)
Différences finies	2D	1000×1000	~8 Mo
Éléments finis	3D	100 ³	~800 Mo
Volumes finis	4D	50 ⁴	~12 Go
Éléments spectraux	5D	20 ⁵	>100 Go

Tableau 8 : Consommation mémoire typique par méthode et dimension.

5.6.4 Limitations des méthodes classiques & développement d'approches disruptives

L'explosion de la complexité des systèmes à modéliser via des EDP dépasse les capacités des méthodes classiques. La combinaison de la croissance du volume de données, de l'exigence de précision et des problèmes en dimension élevée pousse vers des alternatives potentiellement nouvelles. Les approches émergentes, telles que l'informatique quantique, les réseaux de tenseurs ou les méthodes hybrides IA/physique, ouvrent des perspectives prometteuses.

⁹⁴ Lu, L. (2021). **Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators.** *Nature Machine Intelligence*, 3, 218–229.

⁹⁵ Raissi, M. (2019). **Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations.** *Journal of Computational Physics*, 378, 686–707.

⁹⁶ Peruzzo, A., (2014). **A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor.** *Nature Communications*, 5, 4213.

⁹⁷ Saad, Y. (2003). **Iterative Methods for Sparse Linear Systems** (2nd ed.). SIAM.

⁹⁸ Trefethen, L. N. (1996). **Finite Difference and Spectral Methods for Ordinary and Partial Differential Equations.**

⁹⁹ Quarteroni, A. (2008). **Numerical Approximation of Partial Differential Equations.** *Springer*.

Limites des méthodes classiques : Comme présentés dans le chapitre précédent, les méthodes numériques classiques (éléments finis, volumes finis, différences finies) souffrent de plusieurs limitations :

- Explosion combinatoire du nombre de degrés de liberté : pour une précision donnée, la complexité croît exponentiellement avec la dimension du système (effet dit de "curse of dimensionality").
- Limitations en précision et temps de calcul : malgré l'optimisation des solveurs, la simulation de phénomènes complexes (multi-échelles, multi-physiques, non linéaires) reste très coûteuse, voire inabordable sur des supercalculateurs classiques¹⁰⁰.
- Problèmes mal posés ou inversement instables : typiques dans la résolution de problèmes inverses ou d'identification de paramètres¹⁰¹.

Ces constats motivent une exploration de nouvelles classes de modèles computationnels.

¹⁰⁰ Dongarra, J. (2022). **HPC Achievement and Impact**. *Communications of the ACM*, 65(1), 78–85.

¹⁰¹ Engl, H. W. (1996). **Regularization of Inverse Problems**. *Mathematics and Its Applications*, Vol. 375, Springer.

6. POSITIONNEMENT SUR LES EDP

6.1 VISION PAR DOMAINE D'APPLICATION

6.1.1 Finance

Le domaine financier utilise les EDP pour la valorisation des produits dérivés et la gestion des risques de marché.

Historiquement introduites en finance quantitative pour formaliser la valorisation des produits dérivés, les équations aux dérivées partielles (EDP) sont devenues un outil fondamental pour modéliser les dynamiques de prix et de risques dans les marchés financiers. Elles fournissent le cadre mathématique à partir duquel s'est structurée la théorie moderne des produits dérivés.

Les marchés financiers échangent des actifs dont le prix se détermine à chaque instant par l'équilibre de l'offre et de la demande. La valeur de ces actifs fluctue donc à chaque instant ce qui constitue de facto un risque pour le détenteur de ces actifs. Les produits financiers dérivés sont les produits dédiés à la gestion de ce risque. Un produit dérivé peut par exemple garantir un court à terme, le versement de montants conditionnels à des conditions de marché ou encore déterminer la quantité équitable d'échange d'un actif dans un autre à une date future.

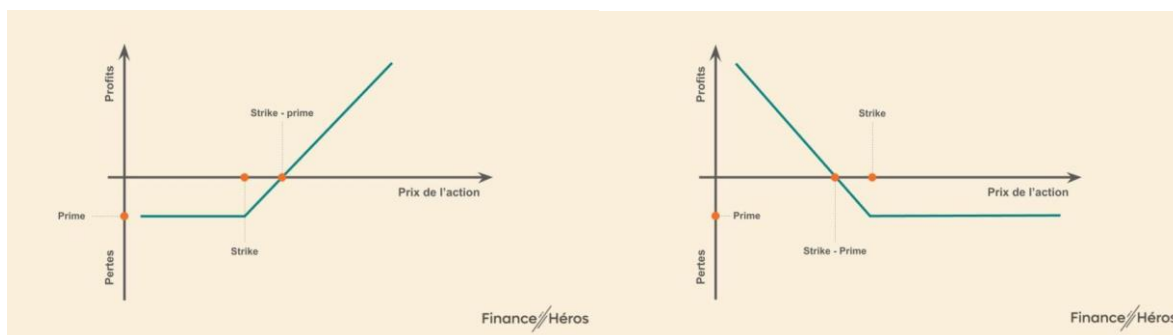


Figure 13 : Profit d'une option d'achat (call option) et d'une option de vente (put option) en fonction de la prime initialement payée, du strike et du prix de l'action sous-jacente¹⁰².

Plus généralement, tout versement à une date future déterminé aujourd'hui comme un montant calculé à partir de l'ensemble des conditions de marché d'ici à cette date future est un produit dérivé.

Les travaux de F. Black, M. Scholes et A. Merton dans les années 1970 ont posé les bases de la valorisation des produits dérivés. Leur approche repose sur l'hypothèse d'absence d'opportunité d'arbitrage : si deux flux financiers ont la même valeur à une date future, ils doivent pouvoir s'échanger de manière équitable dès aujourd'hui. À partir de ce principe, ils montrent qu'il est possible de déterminer la valeur actuelle d'un flux futur en construisant une stratégie d'investissement autofinancée, c'est-à-dire qui ne nécessite pas d'apport extérieur et qui aboutit au même montant à l'échéance.

Leurs travaux établissent les conditions d'existence d'une telle stratégie ainsi que le calcul du montant initial à investir pour la mettre en œuvre. Ce montant correspond au prix du produit dérivé. Ce prix dépend des actifs sous-jacents du produit et il peut être exprimé comme une fonction de ces actifs. Cette fonction satisfait une équation aux dérivées partielles (EDP) dont la dimension est égale au

¹⁰² <https://finance-heros.fr/produit-derive/>

nombre d'actifs considérés plus une variable de temps. Les paramètres de cette EDP dépendent du modèle choisi pour décrire l'évolution des prix des actifs, qui peut être non linéaire.

En pratique, plus le nombre d'actifs augmente et plus le modèle de diffusion est complexe, plus il devient difficile de résoudre l'EDP associée au prix du produit dérivé.

Au-delà des produits dérivés et de la finance de marché, les équations aux dérivées partielles sont largement utilisées dans d'autres domaines de la finance. Elles interviennent dans la modélisation des taux d'intérêt (ex. Vasicek, CIR, Hull-White), dans la valorisation des produits structurés, mais aussi dans les problématiques de gestion des risques, de solvabilité ou de liquidité. En finance d'entreprise, les EDP permettent de modéliser la valeur des obligations convertibles, des stratégies de remboursement de dette ou encore des décisions d'investissement en présence d'options réelles.

Dans le domaine de l'assurance, elles apparaissent dans l'évaluation des garanties financières, des polices indexées sur des actifs de marché et dans la modélisation des risques extrêmes. Enfin, dans la régulation bancaire (Bâle III, Solvabilité II), elles sous-tendent les modèles internes utilisés pour simuler les pertes potentielles d'un portefeuille sous contraintes réglementaires. Cette transversalité montre combien les EDP sont devenues un langage commun à de nombreux métiers de la finance, articulant dynamique aléatoire, optimisation intertemporelle et contraintes économiques.

Les EDP interviennent aussi dans des tâches d'ajustement de modèle aux données, notamment via des problèmes de *calibration*.

La calibration consiste à ajuster les paramètres du modèle (volatilité, taux, corrélation, etc.) pour que les prix théoriques obtenus en résolvant une EDP correspondent aux prix observés sur le marché. C'est un problème d'optimisation classique, souvent résolu par moindres carrés ou méthodes de gradient. Par exemple, dans le modèle de Heston, on ajuste les paramètres de volatilité stochastique pour reproduire la courbe des options¹⁰³. Ce processus vise à retrouver des paramètres à partir de données de sortie. Cela inclut l'identification de la *volatilité implicite* dans les modèles de tarification, la reconstruction de la *surface de volatilité locale* à partir des prix d'options dans le cadre des modèles Markoviens¹⁰⁴. On rencontre également ce type d'approche pour estimer des *processus stochastiques sous-jacents* à partir de données bruitées ou incomplètes¹⁰⁵.

Ces problèmes sont souvent mal posés, sensibles au bruit ou aux erreurs de mesure. On utilise alors des techniques de *régularisation* (ex. Tikhonov, méthodes variationnelles) pour stabiliser la solution.

Des approches plus récentes s'appuient sur l'apprentissage automatique pour améliorer ou accélérer la calibration, notamment via des réseaux de neurones supervisés ou des modèles **dits physics-informed (PINNs)**. Ces techniques permettent de traiter des modèles complexes ou de réduire fortement le temps de calcul^{106 107 108}.

¹⁰³ Gatheral, J. (2006). **The Volatility Surface: A Practitioner's Guide**. Wiley Finance Series. Wiley. ISBN: 978-0-470-01282-4.

¹⁰⁴ Dupire, B. (1994). **Pricing with a Smile**. *Risk Magazine*, 7(1), 18–20.

¹⁰⁵ Cont, R. (2004). **Financial Modelling with Jump Processes**. Chapman & Hall/CRC Financial Mathematics Series. ISBN: 978-1584884139.

¹⁰⁶ Han, J. (2018). **Solving high-dimensional partial differential equations using deep learning**. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 115(34), 8505–8510.

¹⁰⁷ Horvath, B. (2021). **Deep learning volatility: A deep neural network perspective on pricing and calibration in (rough) volatility models**. *Quantitative Finance*, 21(1), 11–27.

¹⁰⁸ Ruf, J. (2020). **Deep Hedging: Learning to Hedge under Generic Market Frictions**. *arXiv preprint*.

6.1.2 Énergie

La résolution des EDP est essentielle dans l'industrie pétrolière. Elles sont utilisées dans différents domaines d'applications historiques : L'imagerie sismique (et problème inverse), la simulation des écoulements des fluides dans les réservoirs à huile ainsi que la simulation géomécanique.

Plus récemment, la réduction des émissions de gaz à effet de serre est devenue un enjeu majeur. La modélisation des EDP peut contribuer à ces objectifs en optimisant les processus de récupération et en intégrant des solutions plus durables, comme la capture et le stockage du carbone (CSC), le monitoring de l'injection du CO₂ dans les réservoirs déplétés ou dans les réservoirs aquifères.

Également, dans le cadre de la transition énergétique, un important effort est réalisé dans le domaine de la simulation et modélisation des batteries et dans l'optimisation des fermes d'éoliennes. Dans le cadre de la simulation des batteries, l'objectif est d'améliorer leur efficacité et leur durée de vie, facilitant ainsi l'intégration des énergies renouvelables intermittentes dans le réseau électrique et la mobilité. Les fermes d'éoliennes, quant à elles, nécessitent des modèles précis pour optimiser leur placement et leur fonctionnement, maximisant ainsi la production d'énergie tout en minimisant l'impact environnemental. De même, l'énergie solaire bénéficie de simulations avancées pour améliorer l'efficacité des panneaux photovoltaïques et optimiser leur déploiement à grande échelle. Ces technologies, combinées à des modèles d'EDP sophistiqués, sont essentielles pour accélérer la transition vers un système énergétique plus durable et résilient

La complexité de ces applications requiert des solutions numériques sophistiquées, s'appuyant sur des méthodes comme les éléments finis, les volumes finis et les différences finies, ainsi que sur des algorithmes avancés d'optimisation et de contrôle. Ces approches permettent de résoudre efficacement les EDP complexes, garantissant ainsi des performances optimales dans les opérations pétrolières et énergétiques. Elles utilisent des ressources HPC et GPU pour accélérer les calculs pour les simulations à grande échelle et font appel, de plus en plus, à des modèles de machine learning pour améliorer la précision de calcul et réduire les coûts de simulation.

6.1.3 Automobile

Les EDP sont essentielles pour optimiser l'aérodynamisme et la gestion thermique des véhicules électriques, en réduisant la traînée et en améliorant le refroidissement des batteries¹⁰⁹. Elles sont aussi utilisées dans la fabrication avancée, notamment pour simuler les contraintes mécaniques et thermiques sur les châssis et composants, garantissant résistance et légèreté.

En fabrication additive, les EDP permettent d'améliorer la qualité des impressions 3D métalliques, en limitant les distorsions et en maîtrisant la microstructure des alliages, optimisant ainsi la fiabilité et les performances des pièces moteur¹¹⁰. L'industrie automobile exploite les EDP dans pratiquement tous les domaines de la R&D et du cycle de vie du véhicule. La résolution des EDP permet de réduire les temps de développement, d'atteindre les objectifs CO₂, d'améliorer le confort acoustique et de pousser l'innovation stylistique. Elle intervient avant même la réalisation d'un prototype.

En effet, la quasi-totalité des phénomènes aérodynamiques pertinents (écoulement extérieur, refroidissement moteur, interaction pneu/sol, dispersion d'eau ou de poussières) est traitée par un système d'EDP : les équations de Navier-Stokes couplées à l'équation de continuité et, lorsque la thermique intervient, à l'équation d'énergie.

¹⁰⁹ Versteeg, H. K. (2007). **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method** (2nd ed.). Pearson Education.

¹¹⁰ Boettinger, W. J. (2002). **Phase-field simulation of solidification**. *Annual Review of Materials Research*, 32, 163–194.

La simulation de l'aérodynamisme par la résolution d'EDP est cruciale pour l'évolution du secteur automobile avec des gains industriels concrets notamment sur le bruit aérodynamique, la sécurité (stabilité latérale sous vent de rafale, interaction roue/sol sous pluie) et l'ergonomie.

Ces simulations se basent sur l'équation de Navier Stokes qui conserve la totalité des échelles turbulentes mais qui est très coûteuse computationnellement si elle est résolue directement. Il existe différentes approches de résolutions :

- Direct Numerical Simulation (DNS) est une méthode de résolution directe sans modèle de turbulence. Il est impossible de l'utiliser pour un véhicule entier mais elle peut être utile sur des configurations simplifiées pour valider des parties du véhicule.
- Large-Eddy Simulation (LES) modélise une partie de la turbulence et filtre les échelles les plus petites. Son usage se limite aujourd'hui aux derniers jalons d'un projet à cause de son coût relativement élevé malgré les approximations.
- Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) où les EDP sont moyennées et la turbulence entièrement modélisée. C'est une méthode qui permet de résoudre la simulation aérodynamique en quelques heures mais avec peu de précision.
- Detached-Eddy Simulation (DES, IDDES, WMLES) est une méthode qui hybride RANS et LES pour bénéficier des avantages de chacune des méthodes : précision de LES et coût computationnel de RANS.
- Lattice-Boltzmann (LBM) est une approche qui simule la distribution de particules sur un réseau régulier. Elle permet de traiter des géométries mouvantes (roue tournante, essuie-glace) avec un coût modéré. Elle est disponible en logiciel commercialisé comme PowerFLOW.

Il existe plusieurs techniques de discrétisation pour la représentation du véhicule mais la plus utilisée est la discrétisation à volumes finis (FVM) en utilisant le logiciel open-source OpenFOAM. Les autres méthodes étant moins adaptées pour des problèmes de taille industrielle.

6.1.4 Pharmaceutique

Les industries de la santé utilisent les EDP pour la modélisation du transport des molécules dans l'organisme. La diffusion des principes actifs dans le sang et leur absorption par les cellules sont décrites par des équations de diffusion-réaction. Ces modèles permettent de prédire l'efficacité des médicaments, d'optimiser les dosages et de concevoir des stratégies de libération contrôlée des traitements.

En imagerie médicale, les EDP régissent la propagation des ondes acoustiques et électromagnétiques, jouant un rôle clé dans l'amélioration des techniques d'IRM et d'échographie (*voir Quarteroni, 2019*).

Dans les étapes de développement des procédés, les EDP sont utilisées pour représenter les mécanismes physiques qui régissent les écoulements multi-phases rencontrés dans les différentes étapes de production de produits pharmaceutiques.

6.1.5 Transport ferroviaire

Le secteur ferroviaire et logistique, exploite les EDP pour la modélisation des infrastructures et la gestion des flux de transport. L'optimisation des horaires et des itinéraires ferroviaires repose sur des équations de dynamique des fluides adaptées aux flux de passagers et de marchandises.

De plus, la simulation des vibrations et des contraintes mécaniques sur les rails et les trains est cruciale pour anticiper l'usure et réduire les coûts de maintenance¹¹¹. La maintenance prédictive des infrastructures repose sur des simulations des contraintes mécaniques subies par les rails et les ponts. L'objectif est d'anticiper l'usure et d'optimiser les opérations de maintenance pour garantir la sécurité et la continuité du service¹¹².

6.1.6 Numérique et cybersécurité

Les EDP peuvent constituer un cadre pertinent pour modéliser certains systèmes numériques critiques, en particulier dans les réseaux distribués, les architectures cyber-physiques complexes et, plus largement, dans l'analyse de dynamiques évolutives où les interactions et la propagation d'informations suivent des comportements continus ou semi-discrets dans le temps et l'espace.

En cybersécurité, les EDP permettent de modéliser la propagation d'une attaque informatique dans un réseau sous forme d'un processus de diffusion ou de transport. Ces modèles s'inspirent notamment des équations de type advection-diffusion ou des équations de réaction-diffusion pour représenter la manière dont une menace (par exemple, un ver informatique ou un ransomware) se déplace et se propage dans un réseau d'ordinateurs. Cette approche, illustrée dans les travaux de Bier en 2018¹¹³, fournit un cadre analytique pour comprendre les dynamiques d'infection, identifier les zones vulnérables et simuler des scénarios d'attaque.

Ces modèles permettent également d'explorer l'efficacité de stratégies de confinement ou de réponse à incident, en évaluant leur impact sur la dynamique de propagation. Par exemple, on peut introduire des termes de dissipation locale (correspondant à des mesures de protection, pare-feu, segmentation réseau) dans l'EDP pour simuler leur effet sur le ralentissement de la menace.

Les EDP peuvent aussi être utilisées pour anticiper l'évolution des comportements malveillants, en modélisant l'apprentissage et l'adaptation des attaquants face aux systèmes de défense¹¹⁴. Ces dynamiques adversaires peuvent être approchées par des équations non linéaires inspirées des systèmes dynamiques ou des équations de Hamilton-Jacobi-Bellman, dans une perspective de contrôle optimal ou de théorie des jeux différentiels.

En combinant ces modèles avec des données issues de la supervision de systèmes en temps réel (logs réseau, flux de paquets, comportements utilisateurs), il devient possible de calibrer les équations à partir d'observations et de prédire l'évolution probable d'une attaque. Cela permet de passer d'une posture de défense statique à une posture proactive où la résilience des systèmes peut être analysée et renforcée par simulation.

Enfin, dans les systèmes embarqués, industriels ou critiques (transport, énergie, défense), la modélisation EDP des interactions entre sous-systèmes numériques permet de comprendre les effets en cascade d'une attaque ciblée ou d'une défaillance. Les EDP servent alors à modéliser les couplages entre composants numériques et physiques (cyber-physiques), en prenant en compte à la fois les flux d'information et les contraintes physiques (énergie, température, latence). Cette approche est au cœur de travaux pour sécuriser les architectures hétérogènes embarquées et distribuées.

¹¹¹ Mead, C. (1998). *Analog VLSI and Neural Systems*. Addison-Wesley.

¹¹² Zienkiewicz, O. C. (2005). *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals* (6th ed.). Elsevier.

¹¹³ Bier, D. M. (2018). *Computational methods in materials science: A guide to the use of computational techniques for solving material problems*. Wiley-Blackwell.

¹¹⁴ Luenberger, D. G. (1997). *Optimization by Vector Space Methods* (2nd ed.). Wiley-Interscience.

6.2 CAS D'USAGE DES PARTENAIRES

6.2.1 Crédit Agricole

Parmi les cas d'usage concrets explorés aujourd'hui dans le secteur bancaire, la résolution d'EDP s'impose comme un enjeu pour plusieurs fonctions stratégiques : modélisation stochastique des marchés, évaluation de produits dérivés complexes, gestion du risque de crédit ou encore simulation de scénarios extrêmes. Ces problématiques exigent des méthodes numériques capables de traiter une grande variabilité d'entrées et des régimes dynamiques non linéaires, tout en conservant une robustesse aux perturbations et une précision sur des horizons longs. Dans ce contexte, les approches quantiques et inspirées du quantique font l'objet d'une attention croissante, car elles pourraient, à terme, réduire significativement les coûts de calcul tout en explorant des espaces de solutions plus vastes.

Des établissements financiers majeurs, confrontés à des contraintes réglementaires strictes et à des exigences d'optimisation en temps réel, testent désormais ces nouvelles approches sur des cas d'usage internes représentatifs. L'enjeu est d'identifier dans quelles conditions ces méthodes pourraient compléter, accélérer ou dépasser les méthodes classiques, notamment dans les environnements où les calculs intensifs constituent un goulet d'étranglement.

Ainsi, l'informatique quantique offre ici des perspectives, non pas pour remplacer les solveurs classiques, mais pour ouvrir des pistes hybrides ou alternatives, en particulier dans les cas où la structure mathématique du problème se prête à une reformulation variationnelle ou linéaire. Le recours à certains types de machines permet d'expérimenter des algorithmes variationnels qui approchent la solution sous forme d'état quantique optimisé¹¹⁵. Dans une perspective plus lointaine, des architectures à tolérance aux fautes pourraient permettre de résoudre avec un avantage théorique clair des systèmes issus de la discrétisation d'EDP.

6.2.2 Sanofi

La simulation numérique des écoulements (CFD) joue un rôle critique dans la conception et l'optimisation des réacteurs utilisés en production pharmaceutique, qu'il s'agisse de cuves agitées, de contacteurs statiques ou de séparateurs multiphasiques. Ces procédés complexes nécessitent une compréhension fine des champs de pression, vitesse, cisaillement, turbulence, ainsi que des transferts de masse et de quantité de mouvement à l'échelle locale. Pour capturer ces phénomènes, la mécanique des fluides numérique repose sur la résolution des équations de Navier–Stokes incompressibles, dont le couplage pression–vitesse constitue une étape centrale mais coûteuse.

Ce couplage est classiquement traité à l'aide d'une équation de Poisson pour la pression, introduite afin de garantir l'incompressibilité du fluide. Cette équation, coûteuse à résoudre, représente souvent 50 à 90 % du temps total de calcul dans une simulation CFD. Discrétisée par volumes finis, elle engendre de très grands systèmes linéaires dont la résolution repose sur des algorithmes itératifs (Gauss–Seidel, PISO, SIMPLE, etc.) avec préconditionneurs. En pratique, ces méthodes atteignent vite leurs limites en termes de scalabilité, de parallélisation et de consommation énergétique, surtout dans des contextes industriels où les degrés de liberté se comptent en millions.

Sanofi explore l'hypothèse d'un solveur quantique dédié à l'équation de Poisson, dans le but de soulager les unités classiques (CPU/GPU) de cette charge computationnelle majeure. Grâce à la nature intrinsèquement parallèle de certains algorithmes quantiques, cette approche vise à réduire drastiquement le temps de calcul, améliorer la performance énergétique et transformer en profondeur l'architecture des solveurs CFD. Ce cas d'usage illustre un levier potentiellement structurant pour la

¹¹⁵ Cela a été exploré par le Crédit Agricole et Pasqal dans le cadre de la résolution d'une EDP à visée démonstrative, montrant la faisabilité d'une approche hybride classique-quantique sur un problème réel.

simulation haute-fidélité dans l'industrie pharmaceutique, avec des gains ciblés sur l'étape la plus critique du processus numérique.

6.2.3 Renault

Dans le domaine de l'aérodynamisme automobile, la simulation directe (DNS) des équations de Navier–Stokes permettrait d'obtenir une précision inégalée, sans recours à des modèles de turbulence. Elle offre un accès à des grandeurs physiques fines telles que la pression locale, les forces de traînée ou les spectres de tourbillons. Cependant, à l'échelle d'un véhicule réel (nombre de Reynolds $\approx 10^7$), la taille des plus petites structures turbulentes impose un maillage extrêmement fin ($\Delta x \approx 0,01$ mm), ce qui représente environ 10^{16} cellules pour un domaine de quelques mètres cubes. Une telle complexité rend le calcul DNS irréaliste en pratique, avec des temps d'exécution de plusieurs mois, voire années.

Face à cette contrainte, l'industrie automobile utilise des méthodes de simulation plus rapides (RANS, LES, DES, LBM), mais celles-ci reposent sur des approximations (fermetures, filtres) qui limitent la précision des prédictions fines, notamment pour le sillage, les forces instationnaires ou le bruit aérodynamique. L'objectif est donc d'explorer de nouvelles méthodes numériques capables de combiner la précision de DNS avec les temps de calcul proches de ceux des méthodes RANS ou LES, afin d'intégrer la simulation haute-fidélité dans les boucles de conception standard.

Dans ce cadre, Renault propose un cas d'usage fondé sur une géométrie CAO complète du véhicule. Les sorties recherchées incluent des champs volumiques, des mesures surfaciques, ainsi que des agrégats globaux. L'ambition est d'explorer si un solveur quantique ou hybride pourrait reproduire cette richesse d'information dans des délais compatibles avec les exigences industrielles.

6.2.4 TotalEnergies

Un premier sujet d'étude sont les équations de Navier-Stokes dans le cas d'une simulation de l'écoulement des fluides dans les réservoirs poreux. Le cadre de cette étude est directement lié à l'industrie pétrolière sous une forme d'équation de Darcy qui décrit le flux d'un fluide à travers un milieu poreux.

Un deuxième sujet d'étude est l'équation des ondes qui permet de simuler la propagation des ondes dans le sous-sol et dans des milieux hétérogènes complexes. Les méthodes les plus utilisées reposent sur des schémas différences finies explicites en temps. Ces approches sont extrêmement efficaces pour traiter les très grands problèmes d'imagerie ou d'inversion sismique et donnent lieu à des algorithmes très efficaces. D'autres approches numériques basées sur les éléments finis spectraux sont également à l'étude pour l'imagerie du sous-sol.

Le problème inverse en sismique consiste à déterminer les propriétés du sous-sol à partir des données sismiques mesurées. Il s'agit d'un processus complexe qui nécessite la résolution d'EDP pour modéliser la propagation des ondes sismiques et l'inversion des données pour estimer les paramètres géophysiques du sous-sol comme la vitesse ou la densité. De plus, le calcul du gradient de la fonction coût utilise la méthode de l'état adjoint permettant un calcul efficace sans avoir à recalculer les données simulées pour chaque itération de l'optimisation. Cette approche est particulièrement utile pour les problèmes de grande dimension, où le nombre de paramètres à estimer peut-être très élevé.

Concernant ce dernier point, un travail exploratoire en calcul quantique, visant à encoder l'équation d'onde dans l'équation de Schrödinger dépendant du temps, a été réalisé en partenariat avec le CERFACS et a mené à publication¹¹⁶.

6.2.5 SNCF

La résolution d'EDP est centrale pour modéliser le comportement mécanique, aussi bien solide que fluide, de différents éléments du matériel roulant et des infrastructures. Elle est utilisée notamment pour la simulation et l'optimisation de composants soumis à des contraintes multiples, intégrant l'acoustique, les efforts mécaniques, etc. Elle intervient également dans le développement de nouveaux matériaux, par la recherche de nouveaux alliages répondant à des propriétés cibles comme l'ignifugation ou la disponibilité des matières premières.

Ces problématiques trouvent des applications concrètes dans plusieurs domaines ferroviaires. Par exemple, l'étude de la propagation des vibrations mécaniques et acoustiques, avec des objectifs de confort pour les passagers et de maintenance prédictive des infrastructures. La modélisation du comportement des infrastructures ferroviaires, telles que les rails. La simulation des comportements thermiques et mécaniques dans les organes critiques, tels que le freinage ou les moteurs, ainsi que le design de composants ferroviaires optimisés comme les roues, essieux ou carter.

La résolution de ces problèmes repose sur plusieurs approches mathématiques complémentaires. Elle mobilise des méthodes numériques classiques et s'appuie aussi sur le couplage avec des techniques d'apprentissage automatique, notamment pour optimiser les paramètres de fabrication. Des modèles spécifiques sont également utilisés pour les environnements complexes, tels que l'analyse statistique de l'énergie ou la théorie des rayons, afin de modéliser la propagation acoustique dans des configurations complexes. Les technologies quantiques pourraient, à terme, apporter des gains significatifs en accélérant la résolution de certains systèmes linéaires issus de la discrétisation des EDP, ou via des algorithmes hybrides mêlant calcul haute performance et calcul quantique.

¹¹⁶ Suau Adrien. (2021). **Practical Quantum Computing: Solving the Wave Equation Using a Quantum Approach**, *ACM Transactions on Quantum Computing*, Volume 2, Issue 1.

7. APPROCHES QUANTIQUES POUR LES EDP

7.1 LE POTENTIEL D'UNE APPROCHE QUANTIQUE POUR LES EDP :

L'informatique quantique, en particulier dans sa perspective à long terme (FTQC — *fault-tolerant quantum computing*), représente une opportunité majeure pour la résolution de certaines classes d'équations aux dérivées partielles dont la complexité computationnelle est prohibitive pour les architectures classiques. Les EDP, notamment dans leur forme multidimensionnelle, non linéaire ou couplée, conduisent souvent à des systèmes d'équations linéaires ou non linéaires de très grande taille après discrétisation. Dans ce contexte, la promesse de l'informatique quantique est double : **réduire la complexité algorithmique** (ex. : de $O(n^3)$ à $O(\log n)$ dans certains cas théoriques) et **accéder à des régimes de calcul inexploitable en temps raisonnable avec des machines classiques**.

De l'EDP à l'EDO ou au système linéaire :

Dans la pratique, la majorité des approches numériques pour les EDP passent par une phase de **discrétisation spatiale** via des méthodes telles que les différences finies, les éléments finis ou les volumes finis. Cette étape transforme l'EDP en un système **d'équations différentielles ordinaires** dépendant du temps (méthode des lignes) ou bien en un **système linéaire statique** dans le cas des EDP stationnaires. Ainsi, toute stratégie de résolution doit prendre en compte cette transformation car les algorithmes quantiques doivent être conçus pour s'appliquer aux formes finales du problème, typiquement des systèmes d'EDO ou d'équations linéaires.

7.1.1 EDP dépendantes du temps : vers des solveurs quantiques dynamiques

Dans le cas des EDP temporelles, la discrétisation spatiale génère un grand système d'EDO que l'on peut résoudre en temps à l'aide de schémas explicites ou implicites. Les approches quantiques pertinentes incluent alors :

- les **algorithmes de simulation hamiltonienne** (quantum Hamiltonian simulation), lorsqu'un système peut être formulé sous forme Schrödinger-like ;
- les **méthodes hybrides** où un solveur quantique est utilisé pour accélérer certaines étapes coûteuses (par exemple l'inversion de matrice dans un schéma implicite) ;
- les **quantum dynamical solvers** basés sur la représentation de l'évolution dans des bases fonctionnelles (Fourier, ondelettes) codées quantiquement.

Un exemple emblématique est celui du **Quantum Linear Systems Algorithm (QLSA)** de HHL (*Harrow, Hassidim et Lloyd*¹¹⁷), qui permet théoriquement de résoudre des systèmes linéaires en complexité polylogarithmique en taille sous certaines hypothèses de conditionnement et de structure (matrices creuses, Hermitiennes, etc.). Ce paradigme pourrait être appliqué à l'étape d'inversion de matrices massives dans les schémas implicites classiques des EDP.

7.1.2 EDP stationnaires : système linéaire et solveurs quantiques

Pour les EDP stationnaires (comme les équations de Poisson, Laplace, ou certaines formes d'équations d'état en mécanique), la discrétisation aboutit directement à un **système d'équations algébriques linéaires** : $Ax = b$. C'est dans ce cadre que les **algorithmes quantiques de résolution linéaire** trouvent leur applicabilité maximale, notamment (voir section suivante) :

¹¹⁷ Voir aussi Harrow, 2009

- L'**algorithme HHL** et ses extensions constituent une référence théorique pour l'inversion quantique de matrices sous des hypothèses strictes portant sur l'hermiticité, la parcimonie et le conditionnement de A .
- Des techniques plus récentes reposent sur l'encodage matriciel par **block encoding** et sur des **transformations spectrales** (par exemple via QSVT), permettant de traiter des classes plus larges d'opérateurs linéaires.
- Les **algorithmes variationnels quantiques** ont été développés pour fonctionner sur les machines quantiques actuelles dites **NISQ** (*Noisy Intermediate-Scale Quantum*), caractérisées par un nombre limité de qubits et l'absence de correction d'erreurs à grande échelle. Dans ces approches, le système $Ax = b$ est reformulé comme un problème d'optimisation, typiquement via la minimisation d'une fonction de coût de type $\|Ax - b\|^2$. Ces méthodes, regroupées sous le terme de **Variational Quantum Linear Solvers (VQLS)**, privilégient une exécution hybride quantique-classique et visent à contourner certaines contraintes des algorithmes quantiques exacts, au prix d'une perte de garanties théoriques sur la convergence et la précision.

Une alternative consiste à introduire un **pseudo-temps** dans une EDP stationnaire afin de reformuler le problème comme un processus d'évolution vers un état stationnaire. Cette technique permet d'utiliser les outils quantiques destinés à la simulation dynamique, tout en conservant un objectif de convergence vers une solution stationnaire. Elle est notamment utilisée dans certains solveurs quantiques variationnels pour améliorer la robustesse de la solution et contourner des instabilités algébriques.

7.1.3 Enjeux pratiques et adaptation aux architectures

Cependant, exploiter ces perspectives suppose de **reformuler intelligemment les problèmes** pour qu'ils soient compatibles avec les contraintes actuelles de l'informatique quantique :

- taille de registre limitée ;
- erreurs de lecture et de décohérence ;
- nécessité de convertir les matrices issues de la discrétisation dans une forme "quantum-friendly" (matrices clairsemées, Hermitiennes, normalisées) ;
- compatibilité avec les méthodes variationnelles (VQE, QAOA) sur matériel NISQ.

Ainsi, le **chemin vers une application pratique passe par des reformulations hybrides**, dans lesquelles les solveurs quantiques interviennent dans les étapes les plus coûteuses d'un pipeline classique (par exemple la précondition inverse dans un solveur de type Krylov). Il s'agit souvent d'une collaboration algorithmique entre le quantique et le classique.

7.2 PRINCIPES DE BASE DES ALGORITHMES QUANTIQUES POUR LES EDP

Les EDP, une fois discrétisées, se ramènent fréquemment à des systèmes d'équations linéaires ou d'équations différentielles ordinaires, dont la complexité de résolution croît rapidement avec la dimension du problème ou la finesse du maillage. Les algorithmes quantiques, en exploitant la superposition, l'intrication et l'interférence constructive, offrent une nouvelle classe de méthodes capables de résoudre certains de ces problèmes de manière exponentiellement plus rapide que les algorithmes classiques, dans des conditions précises. Cette section présente les principes fondamentaux qui sous-tendent ces algorithmes quantiques, leur champ d'application dans le cadre des EDP, ainsi que les types de formulations mathématiques compatibles avec ces approches.

On distingue notamment les algorithmes à base de simulation hamiltonienne, les solveurs quantiques linéaires (comme HHL et ses variantes) et les approches variationnelles, qui permettent d'envisager une résolution sur les machines quantiques bruitées actuelles (NISQ). La compréhension de ces principes est essentielle pour évaluer le réalisme, les performances théoriques et les limitations pratiques des approches quantiques appliquées aux EDP.

Méthodes variationnelles quantiques appliquées aux EDP :

VQA (Variational Quantum Algorithms) : désignent une classe d'algorithmes hybrides combinant calcul quantique et optimisation classique, initialement introduits pour rendre exploitables les ordinateurs quantiques actuels malgré leurs limitations matérielles. Le principe général consiste à utiliser un **circuit quantique paramétré** pour préparer un état quantique $|\psi(\theta)\rangle$ dépendant d'un ensemble de paramètres variationnels, tandis qu'un optimiseur classique ajuste ces paramètres θ afin de minimiser une fonction de coût associée au problème étudié. Le calcul s'exécute jusqu'à la convergence ou jusqu'à ce qu'une condition d'arrêt soit vérifiée.

Les VQA ont été conçus en priorité pour fonctionner sur les architectures **NISQ**, caractérisées par un nombre limité de qubits et l'absence de correction d'erreurs à grande échelle¹¹⁸. Leur structure hybride permet de limiter la profondeur des circuits quantiques, ce qui les rend relativement plus robustes au bruit et aux erreurs de décohérence que les algorithmes quantiques exacts. Cette robustesse relative constitue l'un des principaux arguments en faveur de leur utilisation dans le contexte technologique actuel. À plus long terme, ces algorithmes restent également pertinents dans le cadre du calcul quantique **tolérant aux fautes**, souvent désigné par les termes **FTQC (Fault-Tolerant Quantum Computing)** ou **LSQ (Large-Scale Quantum computing)**. Dans ce régime, les VQA pourraient bénéficier de registres plus larges et de circuits plus profonds, tout en conservant leur flexibilité algorithmique.

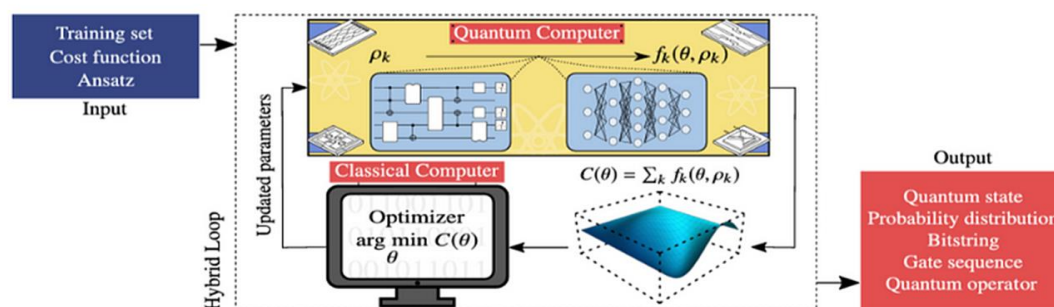


Figure 14 : Algorithme VQA (Source interne)

QAOA (Quantum Approximative Optimisation Algorithm) : est une sous-classe d'algorithmes variationnels quantiques qui peut être interprétée comme une **version discrétisée, paramétrée et pilotée classiquement du recuit quantique**¹¹⁹, adaptée aux ordinateurs quantiques universels à portes logiques. Contrairement au recuit quantique continu, l'évolution est ici remplacée par une succession finie de couches de calcul quantique.

¹¹⁸ Les algorithmes variationnels, bien que prometteurs pour certaines EDP discrétisées, sont purement heuristiques. Leur convergence dépend fortement de la structure du problème et de la qualité de l'optimisation classique. Aucune garantie théorique n'existe sur la précision ou la robustesse des solutions obtenues.

¹¹⁹ Le **recuit quantique** (*quantum annealing*) est une méthode d'optimisation inspirée du recuit simulé classique, dans laquelle un problème d'optimisation est encodé dans un Hamiltonien dit de coût. Le principe repose sur le théorème adiabatique quantique : un système initialement préparé dans l'état fondamental d'un Hamiltonien simple reste dans son état fondamental si l'évolution vers l'Hamiltonien cible est suffisamment lente. Dans ce cadre, la solution du problème correspond à l'état fondamental final du système. Cette approche est notamment exploitée dans les machines quantiques adiabatiques.

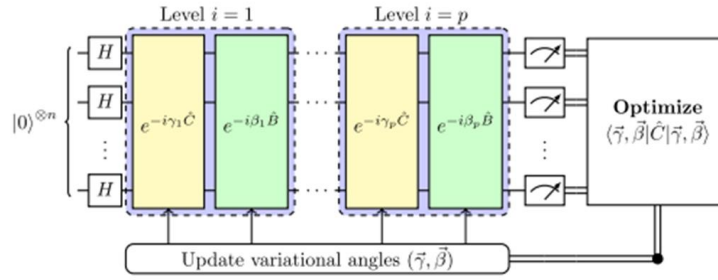


Figure 15 : Algorithme QAOA (Source interne)

Dans chaque couche, l'état quantique évolue successivement sous l'action :

- d'un Hamiltonien de mélange, généralement une somme de matrices de Pauli-X, permettant d'explorer l'espace des configurations,
- puis d'un Hamiltonien de coût, qui encode la fonction objective du problème à optimiser.

Les paramètres associés à ces deux évolutions (souvent notés γ et β) sont ajustés par un optimiseur classique afin de minimiser l'énergie moyenne mesurée par rapport à l'Hamiltonien de coût. Plus le nombre de couches est élevé, plus l'algorithme est capable d'approximer l'évolution adiabatique idéale du recuit quantique. En contrepartie, le nombre de paramètres à optimiser augmente, ce qui accroît le coût classique de l'optimisation et la sensibilité au bruit. En pratique, le QAOA repose donc sur un compromis entre profondeur de circuit, précision de la solution et faisabilité sur les architectures quantiques actuelles.

VQLS : Très proche du fonctionnement de **QAOA**, le **Variational Quantum Linear System Solver** s'en distingue principalement par sa fonction de coût, conçue pour évaluer la proximité de la solution vis-à-vis du **Quantum Linear System Problem (QLSP)**. Cette fonction de coût repose sur les mêmes opérateurs unitaires que ceux utilisés pour construire la **Linear Combination of Unitaries (LCU)**, une technique centrale en simulation quantique permettant de représenter un opérateur linéaire A comme une combinaison pondérée d'opérateurs unitaires :

$$A = \sum_k \alpha_k U_k$$

où les α_k sont des coefficients réels et les U_k des opérateurs unitaires implémentables sur un circuit. Cette décomposition rend possible l'approximation efficace de l'action de A sur un état quantique en remplaçant A par une séquence de blocs unitaires accessibles matériellement.

Par ailleurs, la structure du circuit variationnel ainsi que le choix de l'optimiseur diffèrent en général de ceux employés dans QAOA.

7.3 METHODES BASEES SUR LA SIMULATION QUANTIQUE ET LES TRANSFORMEES QUANTIQUES

La résolution numérique des équations aux dérivées partielles (EDP) est cruciale dans de nombreux domaines scientifiques et industriels. Cependant, les méthodes classiques rencontrent des limitations, notamment le **fléau de la dimensionnalité**, la **complexité computationnelle** et les **problèmes de stabilité numérique**. L'informatique quantique offre des perspectives prometteuses pour surmonter ces obstacles, en exploitant les propriétés intrinsèques des systèmes quantiques pour simuler efficacement des EDP complexes.

La "Schrödingerisation" des EDP : principes mathématiques

La méthode de **Schrödingerisation** consiste à transformer une EDP linéaire en une équation de Schrödinger, permettant ainsi son traitement via des algorithmes de simulation quantique. Cette transformation repose sur l'application d'une transformation de phase déformée (warped phase transformation), qui permet de reformuler l'EDP comme une dynamique unitaire¹²⁰.

Considérons une EDP linéaire de la forme : $\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \mathcal{L}u(x,t)$

où $\mathcal{L}$ est un opérateur différentiel linéaire. En introduisant une fonction $\psi(x,t)$ telle que :

$$\psi(x,t) = e^{i\phi(x,t)}u(x,t)$$

avec $\phi(x,t)$ une phase appropriée, on peut obtenir une équation de Schrödinger pour ψ : $i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$

où H est un opérateur hamiltonien hermitien. Cette reformulation permet d'exploiter les algorithmes de simulation quantique pour résoudre l'EDP initiale¹²¹.

Cependant, cette démarche n'aboutit pas systématiquement à un Hamiltonien hermitien. L'hermiticité de l'opérateur H dépend de manière critique des propriétés analytiques de l'opérateur différentiel initial $\mathcal{L}$, du choix de la transformation de phase $\phi(x,t)$, ainsi que des conditions aux limites imposées. En particulier, de nombreuses EDP d'intérêt industriel (équations de diffusion, équations de transport, opérateurs de Fokker–Planck, équations dissipatives) conduisent naturellement à des opérateurs non auto-adjoints. Dans ces cas, la transformation directe en une dynamique unitaire est impossible sans modification substantielle du problème, ce qui limite fortement l'applicabilité naïve de la Schrödingerisation^{122 123 124}.

Afin de garantir une simulation quantique correcte, l'Hamiltonien effectif doit être hermitien, condition indispensable pour implémenter une évolution unitaire sur un circuit quantique. Cette contrainte a motivé un vaste champ de recherche portant sur des stratégies alternatives, telles que « l'hermitianisation » explicite des opérateurs (par doublement de l'espace de Hilbert), « l'encodage par dilatation unitaire », ou encore « l'approximation spectrale régularisée des opérateurs non hermitiens ». Ces approches introduisent toutefois un surcoût significatif en ressources (qubits auxiliaires, profondeur de circuit, conditionnement spectral), ce qui en limite aujourd'hui la portée pratique^{125 126 127}.

Cette contrainte constitue donc une limitation structurelle majeure de la Schrödingerisation directe des EDP. Elle est aujourd'hui activement étudiée dans plusieurs communautés, notamment pour la

¹²⁰ Cette transformation va ajouter une variable, augmentant ainsi la taille de l'espace de la fonction et nécessiter une transformée de Fourier quantique. Il est pertinent de préciser que cette méthode semble être utilisable uniquement pour des EDP paraboliques !

¹²¹ Bien évidemment, les problèmes ayant naturellement directement la forme d'une équation de Schrödinger, tels que la simulation de systèmes quantiques (notamment celle de molécules), vont pouvoir être simulés plus efficacement grâce à des algorithmes quantiques sans transformation préalable. Néanmoins, ce processus implique une augmentation de la dimension du système et la construction d'un Hamiltonien hermitien spécifique. Il reste réservé à des configurations où la structure de l'EDP permet ce recasting, et son implémentation reste très coûteuse en ressources.

¹²² E. B. Davies. (2007). **Linear Operators and their Spectra**, Cambridge University Press.

¹²³ H. Risken. (1996). **The Fokker–Planck Equation: Methods of Solution and Applications**, Springer.

¹²⁴ M. Zworski. (2012). **Semiclassical Analysis**, AMS.

¹²⁵ D. W. Berry et al. (2015). **Simulating Hamiltonian dynamics with a truncated Taylor series**, *Physical Review Letters*, 114, 090502.

¹²⁶ A. Childs. Y. (2021). **Theory of Trotter error with commutator scaling**, *Physical Review X*.

¹²⁷ G. H. Low. (2019). **Hamiltonian simulation by qubitization**, *Quantum*, 3, 163.

simulation quantique d'opérateurs dissipatifs, de dynamiques ouvertes et de systèmes non hermitiens, où des extensions du cadre standard de la simulation hamiltonienne sont nécessaires^{128 129 130}.

Applications à diverses EDP :

La méthode de Schrödingerisation¹³¹ a été appliquée avec succès à plusieurs EDP, notamment : **Équation de la chaleur** : modélisant la diffusion thermique, **Équation de convection** : décrivant le transport de quantités conservées, **Équation de Fokker-Planck** : utilisée en physique statistique, **Équation de Boltzmann linéaire** : en cinétique des gaz, **Équation de Black-Scholes** : en finance quantitative.

7.4 METHODES BASEES SUR L'INVERSION DE MATRICE

Ces techniques permettent de résoudre les EDP en mimant le processus de résolution classique des schémas explicites. La différence principale est que les amplitudes des vecteurs initiaux et de solution sont celles du vecteur d'état et que les poids de la matrice à inverser sont encodés dans une évolution de cet état (porte quantique). Dans ce cadre, la solution du système $A\vec{x} = \vec{b}$ est encodée dans les amplitudes d'un vecteur d'état quantique $|\vec{x}\rangle$, tandis que le second membre $\vec{b}$ est préparé comme un état initial $|\vec{b}\rangle$. L'action de l'inverse A^{-1} est alors implémentée par l'évolution de cet état selon un circuit quantique.

Pour inverser une porte quantique, il existe deux méthodes principales ayant un analogue classique. :

- **Méthodes spectrales (ex. HHL)** : La première approche consiste à effectuer une diagonalisation effective de l'opérateur A par algorithme quantique de phase estimation, appliquer l'inverse des valeurs propres, puis reconstruire l'état solution. Ce procédé est implémenté par l'algorithme HHL, applicable à des matrices hermitiennes, creuses et bien conditionnées. Il repose sur une simulation hamiltonienne efficace de A , ainsi que sur un contrôle précis de la transformation des phases en amplitudes. Cette technique va nécessiter

¹²⁸ A. Rivas. S. (2014). **Quantum non-Markovianity: characterization, quantification and detection**, *Reports on Progress in Physics*, 77, 094001.

¹²⁹ S. Endo et al. (2021). **Quantum computing in the NISQ era and beyond**, *Nature Reviews Physics*, 3, 2–17.

¹³⁰ J. C. Budich, S. Diehl. (2015). **Topology of density matrices**, *Physical Review B*, 91, 165140.

¹³¹ **Équation de la chaleur (diffusion) :**

- Linden, Montanaro, Shao (2022), **Quantum vs. classical algorithms for the heat equation**;
- Baaquie (2018), **Feynman-Kac formula: the connection between stochastic processes and quantum mechanics**

Équation de convection / transport :

- Budinski. **Quantum Algorithm for Solving the Advection Equation**
- Pfeffer et al. **Spectral quantum algorithm for passive scalar transport in shear flows**

Équation de Fokker-Planck

- Risken. **The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications**.
- Ho & Sasaki (2008), **Fokker-Planck equations and Schrödinger equations**.

Équation de Boltzmann linéaire :

Sur ce point, la littérature la plus solide n'emploie pas toujours le vocabulaire "Schrödingerisation" au sens "transformer Boltzmann en Schrödinger", mais établit un **lien de dérivation** : l'équation de Boltzmann linéaire apparaît comme limite (faible couplage) d'une dynamique de Schrödinger aléatoire.

- Erdős & Yau. (1999/2000), **Linear Boltzmann equation as the weak coupling limit of a random Schrödinger equation**.
- Ioffe. (2003), **The linear Boltzmann equation**.

Équation de Black-Scholes

- Baaquie. (2002), **Quantum Finance: Path Integrals and Hamiltonians for Options and Interest Rates**
- Baaquie. (1997), **A Quantum Field Theory of Forward Rates and Options**.

deux QPE pour passer de la base computationnelle à la base propre de la matrice. Les QPE vont eux-mêmes nécessiter de savoir faire la simulation hamiltonienne de la matrice encodant le problème en question (le même que lors de la Schrödingerisation avant l'ajout du nouveau paramètre).

- **Méthodes polynomiales (QSVT/QSP) :** La seconde approche repose sur l'approximation polynomiale de la fonction inverse via des techniques issues de la *Polynomial Approximation Theory*. L'algorithme QSVT (*Quantum Singular Value Transformation*), ou son équivalent QSP (*Quantum Signal Processing*), permet d'appliquer un polynôme $f(A)$ à un état quantique, à condition que A soit block-encodable, c'est-à-dire encodé dans un sous-bloc unitaire. Ces méthodes permettent notamment de réaliser des transformations rationnelles ou polynomiales sur les valeurs propres, incluant l'inverse régularisé, avec un contrôle fin de l'erreur.

Le choix de la méthode d'encodage dépend de la nature de la matrice :

- Si A peut être décomposée en somme pondérée de matrices unitaires (LCU – *Linear Combination of Unitaries*), un block-encoding est possible, permettant l'usage de QSVT/QSP.
- Si A est hermitienne, il est possible de construire une simulation hamiltonienne par des méthodes de Trotterisation, de séries de Taylor tronquées ou de techniques avancées comme qubitization, pour implémenter HHL. Il est à noter qu'une matrice non hermitienne peut être rendue hermitienne, par hermitianisation, par exemple via l'extension $A \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & A^+ \\ A & 0 \end{pmatrix}$, au prix d'un surcoût en ressources.

Applicabilité aux EDP discrétisées et limites pratiques :

Lorsque les EDP considérées sont **linéaires**, et que leur discrétisation conduit à des matrices bien structurées (creuses, bien conditionnées, à spectre borné), les approches quantiques de type **HHL**, **QSVT/QSP** ou **VQLS** peuvent être envisagées comme des briques théoriques pertinentes pour la résolution de schémas implicites. Ces algorithmes s'inscrivent dans le cadre général du **Quantum Linear System Problem (QLSP)**, dont l'objectif est d'encoder la solution du système linéaire dans les amplitudes d'un état quantique. Dans les cas où une EDP peut être ramenée à un système linéaire bien conditionné, les algorithmes comme HHL ou QSVT offrent un intérêt théorique. Néanmoins, malgré leurs avantages asymptotiques sur le papier, les conditions nécessaires à leur bon fonctionnement (accès oracle efficace, préparation rapide de l'état initial, contrôle du conditionnement, gestion des entrées/sorties) sont rarement réunies dans des cas industriels concrets. En conséquence, ces méthodes restent aujourd'hui essentiellement confinées à des démonstrations de principe ou à des problèmes de taille réduite.

Lorsque les EDP considérées sont **linéaires, homogènes et paraboliques**, et que leur discrétisation conduit à des **matrices hermitiennes**, il est possible de reformuler le problème sous la forme d'une **équation de Schrödinger effective**. Cette transformation, connue sous le nom de *Schrödingerisation*, repose sur l'introduction d'une variable auxiliaire (généralement traitée dans l'espace de Fourier) afin d'encoder l'évolution dissipative ou diffusive comme une dynamique unitaire dans un espace de Hilbert étendu. Cette reformulation permet alors d'exploiter directement les algorithmes de **simulation hamiltonienne quantique** pour approximer l'évolution de la solution. Le prix à payer est une augmentation de la dimension du problème ainsi qu'une contrainte forte sur la structure spectrale de l'opérateur, ce qui limite l'applicabilité de cette approche à des classes d'EDP bien spécifiques.

Lorsque les EDP sont **non linéaires**, la situation est nettement plus restrictive. Certaines approches variationnelles quantiques (VQA), des cadres hybrides quantique–classique ou des méthodes inspirées du recuit quantique peuvent être envisagées en reformulant la résolution de l'EDP comme un

problème d'optimisation. Toutefois, aucune méthode quantique générale ne permet aujourd'hui de traiter directement les non-linéarités de manière native. En particulier, pour les approches issues de l'équation de **Boltzmann** et de ses déclinaisons quantiques (QLBM), la simulation quantique des termes non linéaires (notamment le terme de collision) n'est pas maîtrisée à ce jour. Les travaux existants se limitent soit à des **régimes linéarisés** (par exemple via une linéarisation du terme de collision ou l'utilisation de la méthode de Carleman), soit à des **approches hybrides**, dans lesquelles la non-linéarité est traitée classiquement tandis que les opérations linéaires sont accélérées à l'aide d'algorithmes quantiques. À l'état actuel de la recherche, aucune implémentation entièrement quantique et opérationnelle des non-linéarités dans les cadres de type QLBM n'est disponible.

Dans ces approches modernes, la primitive algorithmique centrale n'est plus nécessairement la simulation hamiltonienne, mais plutôt la capacité à **block-encoder** l'opérateur matriciel contenant l'information du problème. En effet, la majorité des transformations utiles ne sont pas unitaires par nature. Le block-encoding permet d'implémenter ces opérations de manière indirecte, en encodant la matrice cible dans un sous-bloc d'un opérateur unitaire agissant sur un espace élargi, typiquement contrôlé par un registre auxiliaire. Ce formalisme est indispensable pour l'utilisation d'algorithmes tels que QSVT ou QSP.

Par ailleurs, ces techniques autorisent également l'application de fonctions plus générales que l'inverse, notamment les **exponentielles négatives de matrices** ($e^{-\tau A}$), ce qui est essentiel pour l'**évolution en temps imaginaire**. Ce mécanisme joue un rôle central dans la résolution de certaines EDP paraboliques, ainsi que dans les méthodes variationnelles visant la préparation d'états fondamentaux ou la relaxation vers des états stationnaires.

Enfin, il convient de souligner que la **complexité algorithmique** de ces méthodes dépend fortement du **conditionnement spectral** κ de la matrice A . Dans le cas de l'algorithme HHL, cette dépendance est quadratique en $\mathcal{O}(\kappa^2)$, ce qui limite sévèrement son applicabilité pratique. Des approches plus récentes, fondées sur QSVT, permettent de réduire cette dépendance à un régime quasi linéaire, mais au prix d'exigences accrues sur l'encodage de l'opérateur. La conception de **préconditionneurs quantiques efficaces** constitue dès lors un enjeu majeur et reste un domaine de recherche largement ouvert.

7.5 IMPLEMENTATION SUR ORDINATEURS QUANTIQUES

Une fois l'équation aux dérivées partielles (EDP) transformée en une équation de Schrödinger via la méthode de Schrödingerisation, l'objectif est de construire une simulation hamiltonienne de l'opérateur hermitien résultant. Plusieurs algorithmes quantiques permettent d'**implémenter cette simulation hamiltonienne**, chacun avec des hypothèses et des coûts différents. On peut citer notamment :

- **La méthode de Trotter-Suzuki**, qui repose sur la décomposition exponentielle du Hamiltonien en une suite de termes commutant approximativement.
- **Les séries de Taylor tronquées**, qui offrent une meilleure précision asymptotique mais nécessitent une gestion fine des coefficients.
- **La qubitisation**, en lien avec les techniques de **block-encoding**, qui permet une simulation efficace lorsque le Hamiltonien est encodable dans une matrice unitaire plus grande.
- **La simulation basée sur QSVT**, qui autorise une transformation polynomiale directe des valeurs propres du Hamiltonien, après construction d'un encoding unitaire approprié.

Ces méthodes ont en commun de **ne pas résoudre directement l'EDP**, mais de permettre l'évolution d'un état quantique sous l'effet d'un opérateur issu de la discrétisation de l'EDP, une étape indispensable dans les algorithmes comme HHL ou dans les approches variationnelles.

7.5.1 Décomposition de Trotter-Suzuki

La décomposition de Trotter-Suzuki est une méthode permettant d'approximer l'évolution temporelle d'un système quantique dont le Hamiltonien peut être décomposé en une somme de termes non commutatifs¹³². Si le Hamiltonien H peut être exprimé comme $H = \sum_{j=1}^m H_j$, alors l'opérateur d'évolution temporelle sur un petit intervalle δt peut être approximé par :

$$e^{-iH\delta t} \approx \prod_{j=1}^m e^{-iH_j\delta t} + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

(approximation de Trotter d'ordre 1). Des généralisations telles que les **schémas de Suzuki** introduisent des **termes correctifs symétriques** pour atteindre des ordres supérieurs, comme $\mathcal{O}(\delta t^3)$, $\mathcal{O}(\delta t^4)$, etc., au prix d'une augmentation exponentielle du nombre d'exponentielles à évaluer¹³³.

Limites fondamentales : non-commutativité, erreurs accumulées et coût quantique

Un point crucial est que cette décomposition **n'est exacte que si les opérateurs H_j commutent entre eux**, ce qui est rare en pratique, notamment dans les équations issues de la physique, des systèmes multi-échelles ou des couplages fortement anisotropes. En général, les termes de commutateur introduisent des erreurs systématiques d'ordre supérieur. Plus précisément, l'erreur de Trotter d'ordre 1 est gouvernée par :

$$\mathcal{E}_1 = \frac{1}{2} \sum_{j < k} [H_j, H_k] \delta t^2 + \mathcal{O}(\delta t^3).$$

Ces erreurs **s'accumulent au cours du temps** si l'on répète l'évolution sur de longues durées et cela peut poser des problèmes en simulation quantique, car les portes quantiques doivent implémenter des **opérations unitaires précises**. Or, dans le cas des EDP transformées (via Schrödingerisation ou quantification directe), les opérateurs H_j dérivent souvent de **discrétisations différentes (diffusion, advection, réaction)** qui ne commutent pas naturellement. Cela impose une contrainte sur le **pas de temps δt** mais aussi sur la **profondeur du circuit quantique**.

De plus, en simulation quantique, **chaque exponentielle $e^{-iH_j\delta t}$ doit être décomposée en portes élémentaires**, ce qui peut être coûteux en nombre total de portes et en profondeur logique si l'on souhaite une précision élevée. Dans les architectures NISQ, cette profondeur est limitée par le bruit, rendant les hautes précisions inaccessibles dans certains cas.

Application aux EDP : inspiration classique et adaptation quantique

Dans le cas des EDP, la Trotterisation a une double utilité :

1. **Reformuler l'évolution d'un système continu en une séquence discrète** gérable algébriquement sur un simulateur quantique.
2. **Transposer des méthodes classiques connues** de splitting d'opérateurs (notamment dans les schémas de Lie ou Strang) au cadre quantique.

¹³² Cette approximation devient une formule exacte dès le premier ordre si tous les couples de termes commutent.

¹³³ Avtandilyan, A. A. (2024). **Optimal-order Trotter-Suzuki decomposition for quantum simulation on noisy quantum computers**

Par exemple, pour l'équation de la chaleur en 1D, une discrétisation spatiale (par différences finies) donne une matrice tridiagonale H représentant le Laplacien¹³⁴. Ce Hamiltonien peut être **décomposé en deux sous-opérateurs** A et B , chacun agissant uniquement sur les points pairs ou impairs du maillage. Cette décomposition permet d'**implémenter séparément** les exponentielles de A et B , soit : $e^{-i(A+B)\delta t} \approx e^{-iA\delta t}e^{-iB\delta t}$, ce qui simplifie fortement la programmation quantique.

Par ailleurs, cette approche est **largement utilisée en calcul classique** dans la simulation de phénomènes complexes (fluide, chimie, finance), sous les noms de splitting d'opérateurs ou méthodes additives de résolution d'EDP. Le fait qu'elle soit bien comprise en contexte classique est un avantage pour son adaptation en contexte quantique, mais la **prise en compte des contraintes quantiques (unitarité, bruit, profondeur)** constitue un défi spécifique.

En résumé, la Trotterisation est une approche fondatrice mais approchée, qui fournit une bonne porte d'entrée pour les simulations quantiques d'EDP, sous réserve :

- que le système soit suffisamment petit ou régulier,
- que les termes du Hamiltonien soient hermitiens,
- que l'on puisse tolérer une approximation contrôlée liée à la non-commutativité.

Elle demeure aujourd'hui la méthode standard sur les machines NISQ, en attendant l'adoption de méthodes plus avancées (LCU, QSP, etc.) sur machines tolérantes aux fautes.

7.5.2 Estimation de phase quantique (Quantum Phase Estimation - QPE)

L'algorithme d'estimation de phase quantique est un outil fondamental en informatique quantique, permettant d'estimer les valeurs propres d'un opérateur unitaire. Étant donné un opérateur unitaire U et un état propre $|\psi\rangle$ tel que $U|\psi\rangle = e^{2\pi i\theta}|\psi\rangle$, l'algorithme QPE permet d'estimer la phase $\theta \in [0,1)$ avec une précision déterminée par le nombre de qubits utilisés.

Dans le cas des EDP, après transformation en équation de Schrödinger, le Hamiltonien H est exponentié pour obtenir l'opérateur unitaire $U = e^{-iHt}$. L'algorithme QPE peut alors être utilisé pour estimer les valeurs propres de H . Le rôle de QPE est d'estimer θ avec une précision contrôlée par le nombre de qubits utilisés dans le registre de phase. Cette estimation est cruciale pour de nombreuses applications, dont l'approximation des valeurs propres de Hamiltoniens en mécanique quantique, la recherche des états fondamentaux¹³⁵, ou encore l'analyse spectrale dans le cadre de la résolution d'EDP.

Structure détaillée de l'algorithme QPE :

L'algorithme se déroule sur **deux registres quantiques** :

- Un **registre auxiliaire** (ou registre de phase), composé de n qubits, initialisé dans l'état $|0\rangle^{\otimes n}$.
- Un **registre de travail**, contenant l'état $|\psi\rangle$, supposé être un vecteur propre (ou proche) de U .

L'algorithme suit les étapes suivantes :

¹³⁴ Beimbet D. (2024). **A Quantum Approach for Exploring the Numerical Results of the Heat Equation**

¹³⁵ Appliquée à une superposition d'états propres de l'opérateur, cette routine permet d'effectuer une décomposition spectrale du vecteur par rapport à cet opérateur. Il convient de rappeler que le bon fonctionnement de cet algorithme repose sur l'utilisation de la transformée de Fourier quantique.

1. **Superposition initiale** : On applique une porte Hadamard H à chaque qubit du registre auxiliaire, ce qui crée un état de superposition :

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle.$$

2. **Applications contrôlées de U** : Pour chaque qubit j du registre de phase, on applique une opération contrôlée CU^{2^j} , ce qui encode la phase θ dans les amplitudes :

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi i k \theta} |k\rangle |\psi\rangle.$$

Remarque importante : La réalisation de CU^{2^j} est souvent l'étape la plus coûteuse du circuit. Elle suppose l'implémentation efficace de l'opérateur U^{2^j} , ce qui, en général, nécessite l'utilisation de **Trotterisation** ou d'autres techniques d'approximation de l'exponentielle d'un Hamiltonien.

3. **Transformée de Fourier quantique inverse (QFT^{-1})** : On applique la QFT^{-1} au registre de phase. Cela fait interférer les amplitudes pour concentrer la probabilité de mesure autour de l'estimation binaire de θ .
4. **Mesure** : La mesure du registre de phase donne une approximation de θ sous forme d'un entier $\tilde{k} \in 0, \dots, 2^n - 1$ tel que : $\theta \approx \frac{\tilde{k}}{2^n}$.

7.5.3 Difficultés d'implémentation et lien avec la Trotterisation

Le point critique de l'implémentation de QPE réside dans le fait que l'opérateur unitaire **n'est pas naturellement décomposable** en portes élémentaires sur un circuit quantique. Pour cette raison, on utilise typiquement la **décomposition de Trotter-Suzuki** ou d'autres techniques d'approximation exponentielle (comme la méthode de Taylor ou la simulation hamiltonienne par séries de Chebyshev).

Chaque puissance U^{2^j} est alors approximée par :

$$U^{2^j} \approx \left(\prod_{l=1}^m e^{-iH_l \delta t} \right)^{2^j \cdot r},$$

avec $H = \sum_l H_l$ une décomposition en termes locaux ou commutatifs. Plus j est grand, plus la profondeur du circuit augmente, et plus les erreurs d'approximation s'accumulent. Cela rend **l'algorithme sensible au bruit et peu adapté aux machines NISQ**.

Limitations et conditions de bon fonctionnement :

- **L'état initial doit être proche d'un vecteur propre** de U . Sinon, l'algorithme produit une superposition de phases, rendant l'interprétation difficile.
- **La précision de l'estimation** dépend linéairement du nombre de qubits dans le registre de phase : pour n qubits, la précision est de l'ordre de $1/2^n$.
- **La profondeur du circuit croît exponentiellement avec la précision**, du fait des puissances croissantes de U .
- **Les erreurs dues à la Trotterisation** s'additionnent et peuvent fausser la reconstruction de θ .

- **L'algorithme est peu robuste aux erreurs de portes ou de phase** et nécessite une correction d'erreur efficace.

Variantes et extensions :

Plusieurs variantes de QPE ont été développées pour l'adapter aux contraintes pratiques :

- **Iterative QPE** : utilise un seul qubit de phase à la fois et extrait les bits de θ séquentiellement, réduisant le besoin en qubits mais augmentant le nombre d'exécutions.
- **Bayesian QPE** : repose sur un modèle probabiliste et met à jour l'estimation de θ de manière bayésienne en fonction des résultats de mesure.
- **Variational Phase Estimation** : reformule l'estimation de phase comme un problème variationnel, avec circuits plus courts et hybridation quantique-classique.
- **QSVT (Quantum Singular Value Transformation)** : cadre spectral plus général pour appliquer certaines fonctions d'opérateurs, offrant, selon les problèmes considérés, une alternative aux approches fondées sur l'estimation de phase (QPE).

7.5.4 Évolution en temps imaginaire quantique (Quantum Imaginary Time Evolution - QITE)

L'algorithme QITE est une méthode hybride quantique-classique visant à simuler l'évolution en temps imaginaire d'un système quantique. Contrairement à l'évolution en temps réel, l'évolution en temps imaginaire n'est pas unitaire, ce qui pose des défis pour sa simulation sur des ordinateurs quantiques. QITE surmonte cette difficulté en approximant l'évolution en temps imaginaire par une série d'opérations unitaires, permettant ainsi de simuler des processus de relaxation vers l'état fondamental¹³⁶. Dans le contexte des EDP, QITE a été proposé comme piste intéressante pour approcher certaines dynamiques dissipatives ou états fondamentaux, y compris dans des contextes liés à des problèmes de diffusion¹³⁷.

7.5.5 Transformation quantique des valeurs singulières (QSVT) – incluant le traitement du signal quantique (QSP)

Le traitement du signal quantique est une technique avancée permettant de mettre en œuvre des fonctions de matrices Hermitiennes sur un ordinateur quantique. En particulier, QSP permet d'implémenter des fonctions polynomiales d'un opérateur, telles que $f(H)$, en utilisant une séquence de rotations contrôlées et de transformations unitaires.

Dans le contexte des EDP, QSP intervient indirectement pour permettre le filtrage spectral requis dans la construction du circuit d'évolution par Schrödingerisation. Cette routine constitue également un bloc fondamental dans l'implémentation de l'algorithme HHL, en facilitant l'accès à la base propre et aux valeurs propres de l'opérateur. Cela permet notamment d'effectuer l'inversion matricielle nécessaire à la résolution du système linéaire issu de la discrétisation de l'EDP. Ces algorithmes constituent des outils puissants pour la simulation quantique des EDP, chacun offrant des avantages spécifiques en fonction du type d'équation à résoudre et des ressources disponibles. Leur mise en œuvre efficace nécessite une compréhension approfondie des principes sous-jacents et une adaptation aux caractéristiques particulières de chaque problème.

¹³⁶ **A noter** : Il est pertinent de rappeler que l'évolution en temps imaginaire est la solution des EDP paraboliques et qu'elle converge donc vers le même résultat qu'une Schrödingerisation.

¹³⁷ Kumar S. (2024). **Generalising quantum imaginary time evolution to solve linear partial differential equations**. *Nature*.

7.6 ENCODAGE DES DONNEES ET DES OPERATEURS

L'une des étapes les plus critiques dans l'implémentation d'algorithmes quantiques est le choix du schéma d'encodage. La manière dont les données (second membre, conditions initiales, maillages) et les opérateurs (issus de la discrétisation des EDP) sont représentés dans l'espace de Hilbert des qubits conditionne à la fois la faisabilité pratique et la complexité asymptotique des algorithmes utilisés.

Encodage des données dans les amplitudes :

Dans les approches les plus courantes (notamment HHL et ses extensions), les données du problème linéaire résultant de la discrétisation d'une EDP sont encodées dans les **amplitudes** du vecteur d'état quantique. Cela signifie que l'on représente un vecteur classique $b \in \mathbb{R}^N$ par un état quantique normalisé :

$$|b\rangle = \frac{1}{\|b\|} \sum_{i=0}^{N-1} b_i |i\rangle,$$

où les b_i sont les composantes du vecteur source. Cette représentation est puissante en théorie, car elle permet en une seule requête quantique, d'accéder à l'ensemble des composantes b_i , mais elle suppose en pratique l'existence d'un **oracle de préparation d'état** efficace (State Preparation Unit, SPU), ce qui reste un point technique délicat, notamment en NISQ.

Plusieurs méthodes de préparation sont connues : circuits déterministes, préparation à partir de circuits variés (variational state preparation) ou chargement via **QRAM** (quantum RAM). Le choix dépend du compromis entre profondeur de circuit, fidélité et coût en nombre de qubits auxiliaires.

Encodage des opérateurs : block encoding et simulation hamiltonienne

L'opérateur linéaire $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$, issu de la discrétisation d'une EDP (par différences finies, éléments finis, volumes finis, etc.), ne peut pas être appliqué directement sur un ordinateur quantique car il n'est en général **ni unitaire ni normalisé**. Il doit donc être encodé sous la forme d'une opération unitaire agissant sur un espace de Hilbert élargi. Deux grandes familles de techniques sont utilisées à cet effet : le *block encoding* et la *simulation hamiltonienne*.

- **Block encoding.**

Le block encoding consiste à représenter la matrice A comme un sous-bloc d'un opérateur unitaire U agissant sur un registre étendu (incluant des qubits auxiliaires). Plus précisément, A est dit *block-encodable* s'il existe un opérateur unitaire U tel que :

$$U = \begin{pmatrix} A/\alpha & * \\ * & * \end{pmatrix}, \alpha \geq \|A\|$$

où α est un facteur de normalisation bornant la norme spectrale de A , et les blocs notés $*$ correspondent à des sous-matrices non pertinentes pour le calcul. Le bloc A/α est accessible conditionnellement à l'état du registre auxiliaire.

Ce formalisme est central dans les algorithmes de **QSVT** et de **QSP** car il permet d'appliquer de manière contrôlée des fonctions polynomiales ou rationnelles du spectre de A . En particulier, il devient possible d'approximer des opérateurs tels que A^{-1} , $A^{-1/2}$ ou encore des fonctions analytiques de A avec un contrôle précis de l'erreur et de la complexité.

- **Simulation hamiltonienne.**

Dans les cas où A est hermitienne (ou rendue hermitienne par une transformation standard), une autre approche consiste à implémenter directement l'évolution unitaire générée par A , c'est-à-dire l'opérateur : e^{-iAt}

La simulation hamiltonienne vise à approximer cette évolution à l'aide de circuits quantiques via des méthodes telles que la décomposition de Trotter–Suzuki, les séries de Taylor tronquées ou des techniques plus avancées comme la qubitisation. Cette primitive est fondamentale pour les algorithmes basés sur l'estimation de phase quantique (**QPE**), la Schrödingerisation des EDP, ou encore certaines méthodes variationnelles dynamiques. Cette approche est essentielle dans les algorithmes variationnels (VQE, QITE) ou dans la dynamique de diffusion.

En pratique, le **block encoding constitue une généralisation** de la simulation hamiltonienne : toute simulation de e^{-iAt} efficace implique implicitement une forme de block encoding de A , tandis que l'inverse n'est pas toujours vrai. Le choix entre ces deux approches dépend étroitement de la structure de la matrice issue de la discrétisation (hermiticité, creuse, conditionnement) et de l'algorithme quantique ciblé.

Coût en nombre de requêtes : query complexity

L'implémentation d'un algorithme quantique de résolution, comme HHL, QSVT ou un schéma variationnel, repose alors sur l'utilisation répétée de ces blocs unitaires (query operators). Le **coût asymptotique de l'algorithme** (en nombre de requêtes à l'oracle préparant $|b\rangle$ et à l'opérateur unitaire représentant A) détermine la **query complexity**, principale mesure de performance en régime quantique.

Par exemple, dans HHL, le coût en requêtes est de l'ordre :

$$\tilde{O}\left(\kappa^2 \text{poly}\left(\log(n), \frac{1}{\epsilon}\right)\right)$$

où κ est le conditionnement de la matrice A et ϵ la précision d'approximation. Dans QSVT, ce coût est une dépendance **linéaire en κ** (au lieu de quadratique dans HHL) et logarithmique en $1/\epsilon$ grâce à une meilleure gestion des spectres singuliers.

Cas des encodages alternatifs :

Des schémas alternatifs d'encodage peuvent être considérés, notamment l'encodage en **phase** (utilisé dans des approches variationnelles ou QAOA) ou l'encodage **occupationnel** dans des architectures analogiques et fermioniques. Ces méthodes n'apportent généralement pas de gain particulier en précision ou en complexité, ce qui explique leur usage limité à ce jour. Il existe néanmoins des propositions visant à exploiter ces encodages dans des problématiques spécifiques. Par exemple, Steijl¹³⁸ a suggéré qu'un encodage par base logique, analogue à la représentation en point flottant, pourrait permettre de traiter certains termes non linéaires de la Lattice Boltzmann Equation dans un cadre quantique. Cette approche reste exploratoire et dépend fortement de l'encodage des variables dans les registres quantiques, mais constitue une piste intéressante pour contourner les difficultés liées à la non-linéarité en QLBM.

Rôle de la QFT :

Enfin, la **transformée de Fourier quantique** (QFT), bien que fondamentale dans de nombreux algorithmes (factorisation, estimation de phase, etc.), n'intervient ici que comme **changement de base interne** dans certaines constructions de blocs unitaires, par exemple lors du conditionnement spectral dans HHL. Sa description détaillée est reportée à la section sur les techniques d'implémentation avancées.

¹³⁸ Steijl, R. (2020). *Quantum Algorithms for Nonlinear Equations in Fluid Mechanics*. IntechOpen.

7.7 GESTION DES CONDITIONS AUX LIMITES

Les conditions aux limites (CAL) sont des contraintes imposées à la solution sur le bord du domaine spatial dans lequel l'EDP est définie. Elles permettent de tenir compte du contexte physique, géométrique ou fonctionnel du système étudié. Les types classiques de conditions aux limites sont :

- **Conditions de Dirichlet** : la valeur de la solution est imposée sur le bord (ex. température fixée sur une paroi). Par exemple, dans l'équation de la chaleur, des conditions aux limites de Dirichlet¹³⁹ imposent une température fixe aux bords, tandis que des conditions de Neumann imposent un flux thermique constant.

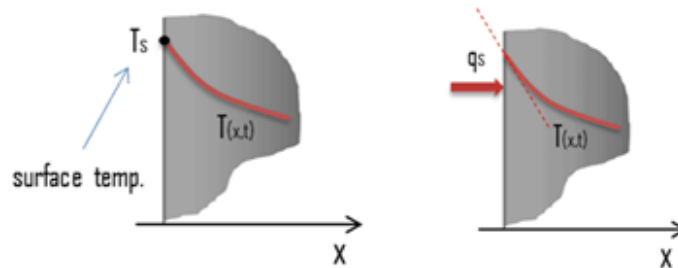


Figure 16 : Conditions aux limites de Dirichlet et de Neumann.

- **Conditions de Neumann** : la dérivée normale de la solution est imposée (flux imposé, comme un gradient thermique constant).
- **Conditions de Robin (ou mixtes)** : combinaison linéaire de la solution et de sa dérivée (par exemple modélisation d'échanges thermiques avec l'environnement).
- **Conditions périodiques** : la solution est supposée identique sur des bords opposés (utile en modélisation de milieux périodiques ou infinis).

Dans certains cas, des conditions aux limites peuvent être **non linéaires, dépendantes du temps**, ou encore **stochastiques**, rendant le problème plus complexe.

Dans la simulation quantique des EDP, les conditions aux limites (Dirichlet, Neumann, Robin, etc.) sont intégrées directement lors de la discrétisation du problème. Elles modifient la structure du système linéaire obtenu, soit en ajustant les termes du second membre, soit en modifiant la matrice (ajout ou suppression de couplages locaux, typiquement au bord du domaine).

Ces modifications **ne posent pas de difficulté particulière** tant que la matrice résultante reste **hermitienne** (ou peut être rendue hermitienne via une extension triviale) et que les **facteurs de normalisation** sont rigoureusement pris en compte.

Les techniques d'encodage usuelles (block-encoding, simulation hamiltonienne) **restent donc valides**, à condition de bien prendre en charge ces ajustements lors de la construction du circuit, en particulier pour le calcul du facteur d'échelle α .

Conditions de Dirichlet et Neumann :

Considérons l'équation de la chaleur définie sur un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, soumise soit à des conditions de Dirichlet $u|_{\partial\Omega} = 0$, soit à des conditions de Neumann $\partial u / \partial n|_{\partial\Omega} = 0$, où n désigne la normale sortante au bord. Après discrétisation spatiale, ces conditions aux limites modifient la structure de l'opérateur différentiel, en introduisant des termes non unitaires ou des contributions de bord explicites dans la matrice associée au problème linéaire. Cette non-unitarité constitue un obstacle

¹³⁹ <https://www.thermal-engineering.org/>

direct à une implémentation quantique naïve, les circuits quantiques n'autorisant que des évolutions unitaires.

Une approche consiste alors à recourir à la **Schrödingerisation** du problème, en reformulant l'EDP sous la forme d'une dynamique unitaire dans un espace de dimension augmentée. Pour cela, une variable auxiliaire p est introduite, conjuguée au temps ou à l'opérateur dissipatif, et une fonction étendue $w(t, x, p)$ est définie de sorte que la dynamique initiale soit encodée dans une équation de type Schrödinger :

$$i \frac{\partial w(t, x, p)}{\partial t} = H w(t, x, p), w(t, x, p) = e^{ipt} u(t, x),$$

où H est un Hamiltonien hermitien agissant sur l'espace étendu (x, p) , construit de manière à reproduire la dynamique dissipative initiale après projection ou intégration sur la variable auxiliaire p .

Cette reformulation permet de restaurer une évolution unitaire globale, compatible avec les contraintes de l'informatique quantique, tout en intégrant implicitement les conditions aux limites dans la définition de l'Hamiltonien étendu. Elle ouvre ainsi la voie à l'utilisation d'algorithmes quantiques standards de simulation hamiltonienne, tels que la décomposition de Trotter–Suzuki, la qubitisation ou les méthodes basées sur QSVT, pour traiter des EDP initialement non unitaires¹⁴⁰.

Conditions d'interface :

Les problèmes avec des conditions d'interface, tels que le problème de Stefan ou les équations de convection linéaire avec coefficients discontinus, posent des défis supplémentaires. La Schrödingerisation peut être adaptée à ces situations en utilisant des schémas numériques spécifiques, comme les méthodes d'interface immergée, qui incorporent les conditions d'interface dans les flux numériques. Cela permet de maintenir la structure unitaire nécessaire pour la simulation quantique.

Conditions aux limites artificielles :

Dans les simulations de domaines non bornés, des conditions aux limites artificielles, telles que les couches absorbantes parfaitement adaptées (PML) ou les conditions de Dirichlet-to-Neumann (DtN), sont utilisées pour éviter les réflexions indésirables. Cependant, ces conditions introduisent des termes non hermitiens dans les équations, ce qui complique leur simulation quantique.

La Schrödingerisation peut être étendue à ces cas en transformant les équations non hermitiennes en systèmes hermitiens équivalents dans un espace de dimension supérieure. Cela permet d'appliquer des algorithmes quantiques unitaires pour simuler des systèmes ouverts avec des conditions aux limites artificielles.

Utilisation du principe de Duhamel :

Lorsqu'une EDP présente des termes inhomogènes, notamment dus à des conditions aux limites dépendant du temps, le principe de Duhamel permet de reformuler le problème en une intégrale temporelle impliquant l'opérateur d'évolution du système homogène.

¹⁴⁰ Il convient toutefois de souligner que la construction explicite de H , son hermiticité effective et le contrôle des erreurs introduites par l'extension dimensionnelle constituent des défis techniques majeurs, en particulier pour des domaines complexes ou des conditions aux limites non homogènes.

Considérons une EDP de la forme¹⁴¹ :

$$\frac{du(t)}{dt} = Au(t) + f(t), \quad u(0) = u_0$$

où A est un opérateur linéaire et $f(t)$ représente le terme inhomogène. Le principe de Duhamel donne la solution :

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

Dans le contexte de la simulation quantique, cette intégrale est approximée en utilisant la technique de combinaison linéaire d'unitaires (LCU), qui permet de représenter l'intégrale comme une somme pondérée d'opérateurs unitaires. Cette approche nécessite une préparation cohérente des états et une estimation précise des coefficients de pondération, ce qui peut être réalisé en utilisant des circuits quantiques spécifiques¹⁴² (voir aussi Jin, 2024).

Transformation en système homogène par augmentation de l'espace des états :

Une alternative consiste à transformer le système inhomogène en un système homogène en augmentant l'espace des états. Cette méthode introduit une variable auxiliaire et reformule le problème initial en un système autonome dans un espace de dimension supérieure. Par exemple, en définissant :

$$\tilde{u}(t) = \begin{bmatrix} u(t) \\ v(t) \end{bmatrix}, \quad \frac{d\tilde{u}(t)}{dt} = \tilde{A}\tilde{u}(t)$$

où $\tilde{A}$ est une matrice élargie incorporant les effets du terme inhomogène $f(t)$. Cette reformulation permet d'appliquer directement les techniques de Schrödingerisation pour simuler le système résultant, en utilisant des circuits quantiques adaptés.

Ces deux approches offrent des moyens efficaces pour intégrer les conditions aux limites dans la simulation quantique des EDP. Le choix entre elles dépend des caractéristiques spécifiques du problème à résoudre, des ressources disponibles et des objectifs de la simulation.

En résumé, la gestion des conditions aux limites dans la simulation quantique des EDP est un défi majeur en raison de la nature non unitaire de ces conditions. La méthode de Schrödingerisation offre une solution élégante en transformant ces problèmes en équations de Schrödinger unitaires dans un espace de dimension supérieure, permettant ainsi l'application d'algorithmes quantiques standards pour leur simulation.

7.8 SIMULATION ANALOGIQUE ET QUMODES

Les *qumodes* désignent des degrés de liberté **continus** (modes bosoniques tels que les modes optiques, micro-ondes ou phononiques) manipulés dans le cadre du calcul quantique à variables continues (**Continuous-Variable Quantum Computing, CVQC**)¹⁴³. Contrairement au calcul quantique à qubits, où

¹⁴¹ Jin, S. (2022). Quantum simulation of partial differential equations via Schrödingerisation. *arXiv preprint arXiv:2212.13969*.

¹⁴² Berry, D. W. (2015). *Simulating Hamiltonian dynamics with a truncated Taylor series*, *Physical Review Letters*, 114, 090502.

¹⁴³ Christian W. (2012). *Gaussian quantum information*, *Reviews of Modern Physics* 84, 621–669

l'information est encodée dans des systèmes à deux niveaux, le CVQC repose sur des observables continues, typiquement les quadratures de champ.

Ce paradigme est particulièrement pertinent pour la simulation de systèmes décrits par des équations différentielles continues, car il permet de représenter directement certaines dynamiques sans recourir systématiquement à une discrétisation spatiale ou temporelle préalable.

Mapping des EDP sur des systèmes de qumodes :

Dans certaines classes d'EDP linéaires, il est possible de reformuler la dynamique du champ solution comme une évolution quantique continue via une transformation appropriée (par exemple de type Schrödingerisation ou encodage hamiltonien). Dans ce cadre, une EDP définie sur un espace de dimension D peut être représentée par une dynamique quantique agissant sur un nombre proportionnel de qumodes, typiquement de l'ordre de D , auquel peut s'ajouter un ou plusieurs modes auxiliaires servant à l'encodage de paramètres, de contraintes ou de conditions aux limites¹⁴⁴.

Cette correspondance autorise une **simulation analogique** de certaines dynamiques continues, où l'évolution physique du système quantique implémente directement l'opérateur différentiel sous-jacent¹⁴⁵. Néanmoins, cette approche reste fortement contrainte par la structure mathématique de l'EDP considérée : elle s'applique principalement à des opérateurs linéaires, faiblement dissipatifs ou pouvant être reformulés sous une forme compatible avec une évolution unitaire ou quasi-unitaire.

Avantages et limites de l'approche analogique :

L'approche par qumodes présente plusieurs atouts conceptuels :

- **Préservation du caractère continu** : l'absence de discrétisation explicite permet de conserver la structure fonctionnelle originale de l'EDP, ce qui peut être avantageux pour certaines dynamiques lisses ou spectrales.
- **Compatibilité avec des simulateurs quantiques analogiques** : en particulier les plateformes photoniques ou à atomes froids, naturellement décrites par des degrés de liberté continus.
- **Réduction de la complexité** : certaines opérations (transformées, évolutions quadratiques) peuvent être réalisées de manière native, sans compilation en portes logiques.

En contrepartie, ces approches souffrent de limitations importantes : difficulté d'implémenter des conditions aux limites générales, contrôle restreint des erreurs, faible programmabilité comparée aux architectures numériques, et applicabilité limitée aux EDP dont la structure est compatible avec l'hamiltonien physiquement réalisable. À ce stade, la simulation analogique par qumodes doit donc être envisagée comme une piste de recherche ciblée, complémentaire des approches numériques quantiques universelles plutôt que comme une solution générique aux EDP industrielles.

7.9 TRANSFORMÉES QUANTIQUES POUR LES EDP

Les transformées quantiques, telles que la **Transformée de Fourier Quantique (TFQ)**, jouent un rôle clé dans la résolution des EDP.

Définition et propriétés :

La TFQ est l'analogue quantique de la transformée de Fourier discrète (DFT) classique.

Pour un registre quantique de n qubits (soit $N = 2^n$ états possibles), elle agit sur une base computationnelle $|x\rangle$ (avec $x \in \{0, \dots, N - 1\}$) comme suit :

¹⁴⁴ Yuan J. (2022). Continuous-variable quantum algorithms for partial differential equations, *Physical Review A* 105, 032423

¹⁴⁵ Yuan J. (2023). Quantum algorithms for linear differential equations in continuous variables, *Quantum* 7, 1030

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

La TFQ est une transformation unitaire, ce qui implique que son inverse est son adjoint hermitien. Elle peut être implémentée efficacement sur un ordinateur quantique à l'aide d'un circuit composé de portes Hadamard et de rotations contrôlées, avec une complexité en $O(n^2)$.

Applications aux EDP :

La **transformée de Fourier quantique (TFQ)** joue un rôle important dans certains algorithmes de simulation d'EDP, notamment lorsque l'opérateur différentiel discret présente une structure circulante (par exemple, avec des conditions aux limites périodiques). En effet, la TFQ est applicable uniquement si l'opérateur différentiel discret présente une structure circulante (ex. Laplaciens périodiques). Cette contrainte limite drastiquement son utilisation à des cas très spécifiques de discrétisation et conditions aux limites.

Dans ce cas, la TFQ peut être utilisée pour **diagonaliser efficacement l'opérateur différentiel**, en le transformant dans une base où il devient diagonal, ce qui facilite :

- L'évaluation de son spectre (dans l'algorithme d'**estimation de phase quantique**, QPE);
- L'application de fonctions spectrales (exponentiation, inversion) dans des algorithmes comme HHL ou ceux basés sur la Schrödingerisation.

La TFQ permet ainsi une réduction de complexité lorsque l'opérateur cible est diagonal dans la base de Fourier, ce qui est le cas pour certaines discrétisations de Laplaciens ou de dérivées périodiques (voir Jin, 2022).

7.10 TRANSFORMATION D'UNE EDP EN PROBLEME D'OPTIMISATION DE TYPE QUBO

Il est parfois possible de reformuler la résolution d'une EDP sous la forme d'un problème d'optimisation quadratique binaire (**QUBO**, *Quadratic Unconstrained Binary Optimization*). Cette approche repose sur deux étapes principales : (i) la discrétisation de l'EDP, menant à un système d'équations algébriques, et (ii) l'encodage binaire des inconnues discrétisées, permettant de réécrire la résolution comme une minimisation quadratique sur des variables binaires.

Dans le cas de certaines EDP simples – en particulier les équations linéaires unidimensionnelles avec conditions aux limites simples – la reformulation en QUBO permet d'envisager une résolution sur des architectures quantiques de type NISQ, en utilisant par exemple des algorithmes variationnels comme le **QAOA** (*Quantum Approximate Optimization Algorithm*). Ce type de reformulation est particulièrement intéressant car les QUBO sont mathématiquement équivalents aux modèles d'Ising en physique statistique, ce qui les rend naturellement adaptés à certaines architectures quantiques émergentes, notamment les recuits quantiques (quantum annealers) et les simulateurs quantiques analogiques.

Exemple : Équation stationnaire de la chaleur en 1D

Considérons l'équation stationnaire de la chaleur unidimensionnelle :

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = 0, \quad x \in [0,1], \quad u(0) = 0, \quad u(1) = 1$$

On discrétise le domaine $[0,1]$ en $N + 2$ points uniformément espacés, avec $u_0 = 0$, $u_{N+1} = 1$, et u_i les valeurs aux points internes ($i = 1, \dots, N$). En utilisant un schéma de différences finies centrées, on obtient pour chaque point intérieur :

$$u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1} = 0$$

Ces équations linéaires peuvent être vues comme des contraintes, que l'on encode sous forme d'une fonction objectif de moindres carrés :

$$\mathcal{L}(u) = \sum_{i=1}^N (u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1})^2$$

Encodage binaire :

Chaque inconnue $u_i \in [0,1]$ est représentée par une expansion binaire sur n bits :

$$u_i = \sum_{k=1}^n b_{i,k} \cdot 2^{-k}, \quad \text{avec } b_{i,k} \in \{0,1\}$$

En injectant cet encodage dans la fonction $\mathcal{L}(u)$, on obtient une expression polynomiale quadratique en les variables binaires $b_{i,k}$. En développant et regroupant les termes, on peut réécrire le problème sous la forme canonique QUBO :

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

où b est le vecteur de toutes les variables binaires, et Q est une matrice symétrique définie par le développement quadratique.

Intégration des conditions aux limites dans la formulation QUBO :

Dans un problème QUBO, les contraintes explicites (comme $u_0 = 0$, $u_{N+1} = 1$) ne peuvent pas être imposées *a priori* comme dans une formulation à contraintes. Toutefois, on peut les **incorporer sous forme de pénalités énergétiques** dans la fonction objectif. Cette méthode permet de rester dans le cadre *unconstrained*, ce qui est essentiel pour les machines adiabatiques ou les annealers comme D-Wave.

Méthode :

- On ajoute à la fonction $\mathcal{L}(u)$ un terme de pénalisation quadratique pour chaque condition aux limites :

$$\mathcal{L}_{AUG}(u) = \mathcal{L}(u) + \lambda_0 \cdot (u_0 - 0)^2 + \lambda_{N+1} \cdot (u_{N+1} - 1)^2$$

Comme u_0 et u_{N+1} sont connus, ces termes peuvent être **développés comme des termes constants ou linéaires** en fonction des autres variables, ou supprimés si u_0 et u_{N+1} sont directement fixés.

- En pratique, si on souhaite laisser certaines frontières flottantes mais *préférées*, ces pénalités jouent le rôle d'**ancrage doux**.

Cela permet une **traduction cohérente des contraintes physiques** du problème dans la formulation QUBO, compatible avec des solveurs binaires sans contraintes explicites.

Limites et généralisation :

Bien que cette approche démontre la possibilité de résoudre certaines EDP simples via des solveurs QUBO, elle présente plusieurs limitations majeures :

- **Explosion combinatoire** : le nombre de variables binaires croît rapidement avec la taille de la grille (N) et la précision en bits (n).
- **Complexité du QUBO** : les coefficients de la matrice Q deviennent rapidement denses et difficiles à paramétrer dans des cas réalistes.
- **Applicabilité limitée** : cette méthode est aujourd’hui essentiellement restreinte à des cas jouets (EDP linéaire, 1D, conditions simples), sans garantie d’extensibilité vers des EDP non linéaires, multidimensionnelles ou couplées¹⁴⁶.

Architectures quantiques adaptées aux formulations QUBO :

Les formulations QUBO sont particulièrement bien adaptées aux **architectures quantiques analogiques**, en particulier celles fondées sur des systèmes physiques capables d’implémenter directement des modèles de type **Ising** ou **potentiels quadratiques binaires**. Deux types d’architectures sont actuellement explorées pour la résolution de tels problèmes : les **recuits quantiques** (quantum annealers) et les **simulateurs analogiques à atomes neutres**.

Recuit quantique : principe et fondements

Le recuit quantique repose sur le théorème adiabatique quantique.

- On prépare le système dans l’état fondamental (ground state) d’un Hamiltonien initial simple H_{init} .
- On fait ensuite varier lentement les paramètres d’un Hamiltonien interpolé :

$$H(t) = A(t)H_{\text{init}} + B(t)H_{\text{QUBO}}, \quad t \in [0, T],$$

Avec $A(0) \gg B(0)$ et $A(T) \rightarrow 0, B(T) \gg 0$.

- Si l’évolution est suffisamment lente et que le **gap spectral** (écart entre le ground state et le premier état excité) ne se ferme pas, le système reste dans le ground state tout au long de l’évolution.
- À l’instant final $t = T$, l’état du système est donc le ground state de H_{QUBO} , lequel représente la solution optimale du problème initial.
- Ce principe transforme ainsi la résolution d’un problème d’optimisation en une dynamique physique adiabatique.

Implémentations matérielles :

- **D-Wave** : utilise des qubits supraconducteurs organisés sur une topologie contrainte (Chimera, Pegasus)¹⁴⁷. Chaque variable binaire est codée par un qubit et les couplages réalisent les interactions du modèle d’Ising. La principale difficulté réside dans le minor embedding, nécessaire pour adapter un graphe logique dense (issu du QUBO) à la connectivité matérielle limitée.
- **Pasqal** : propose des simulateurs quantiques analogiques basés sur des atomes neutres piégés par des pinces optiques. Les interactions contrôlées via le blocage de Rydberg permettent

¹⁴⁶ Un exemple d’implémentation de cette approche appliquée à l’équation de la chaleur est présenté dans :

- Sánchez-González et al. **Solving PDEs with Quantum Annealing: A QUBO Formulation**.
- Ajagekar et al. (2020). **Quantum computing for energy systems optimization: Challenges and opportunities, Energy**
- Farhadian, A. (2025) **A fast quantum algorithm for solving partial differential equations**, *Nature*

¹⁴⁷ Vert, D. (2019). **On the limitations of the Chimera graph topology in using analog quantum computers**. In *Proceedings of the 16th Computing Frontiers Conference*.

d'implémenter des graphes d'interactions plus flexibles que sur D-Wave, ce qui ouvre la voie à des formulations QUBO complexes et à des problèmes dérivés d'EDP multidimensionnelles.

Défis actuels et perspectives :

1. **Encodage des contraintes physiques** : garantir une traduction fidèle des conditions aux limites dans le cadre unconstrained du QUBO.
2. **Robustesse du processus adiabatique** : assurer que le gap spectral reste exploitable dans des problèmes de grande taille.
3. **Évolutivité** : augmenter la taille des registres quantiques analogiques (qubits supraconducteurs, atomes neutres) pour traiter des EDP réalistes.

En résumé, la transformation d'EDP en formulations QUBO constitue une passerelle entre méthodes numériques classiques et approches quantiques analogiques. Le recuit quantique, fondé sur le théorème adiabatique, en fournit une implémentation concrète où l'état fondamental du Hamiltonien final encode directement la solution optimale. Cependant, de nombreux défis techniques et théoriques subsistent avant de rendre ces méthodes applicables à des EDP complexes en physique ou en ingénierie.

7.11 VARIATIONAL QUANTUM ALGORITHMS

Variational Quantum Linear System Solver :

Lorsque certaines EDP peuvent être discrétisées puis reformulées sous forme d'un système linéaire $Ax = b$, il devient possible d'exploiter des méthodes variationnelles quantiques pour approximer leur solution sur des processeurs quantiques bruyants de type NISQ. Parmi ces approches, le **Variational Quantum Linear System Solver (VQLS)** constitue une méthode prometteuse, conçue pour contourner les limitations actuelles en matière de profondeur de circuit et de fidélité des opérations quantiques.

L'objectif de VQLS est d'approximer une solution $|x\rangle$ telle que $A|x\rangle = |b\rangle$, pour une matrice A hermitienne inversible (ou rendue hermitienne via un encodage) et un vecteur cible $|b\rangle$, préalablement préparé sur le circuit quantique.

Contrairement aux approches algébriques classiques (comme l'algorithme HHL), VQLS repose sur une **formulation variationnelle** dans laquelle on prépare un état quantique $|x(\theta)\rangle$ paramétré par un ensemble de paramètres θ au moyen d'un circuit variationnel $U(\theta)$. L'état candidat est ensuite transformé en $|\psi(\theta)\rangle = A|x(\theta)\rangle$ et évalué au regard d'une **fonction coût** bien choisie, dont la minimisation oriente l'optimisation des paramètres θ jusqu'à ce que $A|x(\theta)\rangle \approx |b\rangle$.

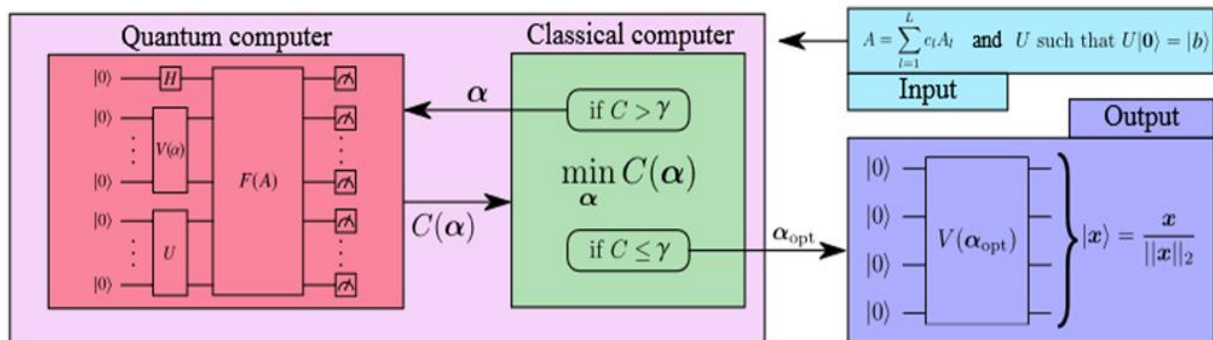


Figure 17 : Circuit VQLS (Source interne)

Formulation de la fonction coût :

La fonction coût typiquement utilisée dans VQLS est la suivante :

$$C(\theta) = \text{Tr}[|\psi(\theta)\rangle\langle\psi(\theta)| \cdot (I - |b\rangle\langle b|)]$$

où $|\psi(\theta)\rangle = A|x(\theta)\rangle$ et I est l'opérateur identité. Cette fonction mesure la projection de l'état image $A|x(\theta)\rangle$ **en dehors** du vecteur cible $|b\rangle$, c'est-à-dire sa composante orthogonale à la solution souhaitée.

Une formulation équivalente, fréquemment utilisée, repose directement sur la maximisation du chevauchement entre $A|x(\theta)\rangle$ et $|b\rangle$, en notant que :

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

Minimiser $C(\theta)$ revient donc à maximiser la probabilité que $A|x(\theta)\rangle$ soit aligné avec $|b\rangle$, ce qui garantit que $|x(\theta)\rangle$ est une bonne approximation de la solution du système linéaire.

Justification géométrique du choix de la fonction coût :

Le projecteur $(I - |b\rangle\langle b|)$ dans la fonction coût joue un rôle clé : il sélectionne la **composante orthogonale** de $A|x(\theta)\rangle$ par rapport à $|b\rangle$. La trace dans l'expression du coût correspond à la **probabilité de rejet** dans la direction $|b\rangle$. Ainsi, lorsque cette fonction est minimale, $A|x(\theta)\rangle$ est **entièrement projeté** dans l'espace dirigé par $|b\rangle$, ce qui correspond à la situation idéale $A|x\rangle = |b\rangle$.

Cette approche est donc géométriquement motivée : au lieu d'inverser explicitement A , on cherche un vecteur $|x(\theta)\rangle$ tel que son image $A|x(\theta)\rangle$ soit **aussi proche que possible** de $|b\rangle$, dans le sens de la norme induite par le produit scalaire de Hilbert.

Implémentation quantique :

Sur le plan pratique, la méthode requiert :

- Un **ansatz paramétrique** $U(\theta)$ pour générer l'état $|x(\theta)\rangle$ à partir d'un état initial $|0\rangle$.
- Un **oracle pour l'application de la matrice A** sous forme d'un opérateur unitaire, soit directement, soit via une approximation Trotterisée si A est exponentiable.
- Un **circuit de mesure** permettant d'évaluer le chevauchement $\langle b|A|x(\theta)\rangle$ à chaque pas de l'optimisation (par exemple via le schéma Hadamard test ou l'estimation de probabilité).

L'optimisation des paramètres θ est ensuite conduite par une boucle classique, en utilisant des méthodes comme COBYLA, SPSA ou Adam, typiques des algorithmes hybrides quantique-classique.

Intérêt pour la résolution d'EDP :

De nombreuses EDP (après discrétisation spatiale par éléments finis ou différences finies) peuvent être ramenées à un système linéaire à grande dimension. VQLS offre une voie pour approximer les solutions de ces systèmes sur des architectures NISQ, en réduisant la profondeur des circuits par rapport aux approches de type HHL, tout en exploitant la structure variationnelle et la capacité d'échantillonnage rapide des circuits quantiques.

Avantage quantique : Les méthodes variationnelles sont des approches heuristiques. Leurs avantages quantiques sont contextuels et dépendent des spécificités du problème et des capacités des systèmes quantiques utilisés.

Les approches variationnelles offrent des pistes prometteuses pour les EDP linéaires ou non linéaires, et cela sur tout type de machines quantiques, qu'elles soient NISQ à l'heure actuelle ou FTQC/LSQ dans le futur. C'est un domaine de recherche actif¹⁴⁸.

Plusieurs raisons rendent les EDP adaptées à un traitement quantique :

- **Structure linéaire ou faiblement non-linéaire :** de nombreuses EDP classiques (Poisson, Schrödinger, diffusion) peuvent être formulées comme des systèmes linéaires massifs, ce qui correspond à des cas d'usage idéaux pour des algorithmes comme HHL.
- **Représentation compacte :** certaines solutions d'EDP (comme les fonctions d'onde ou champs de potentiel) peuvent être approximées efficacement dans une base quantique (Fourier ou ondelettes), réduisant drastiquement le besoin de discrétisation classique.
- **Optimisation intégrée :** Les problèmes inverses associés aux EDP, tels que l'identification de paramètres, se prêtent naturellement aux méthodes variationnelles hybrides quantique-classique, pour lesquelles des gains en convergence et en nombre d'itérations ont été observés dans certains régimes¹⁴⁹.
- **Accélération algorithmique :** certaines primitives classiques comme la transformée de Fourier (QFT), la multiplication matricielle ou la simulation d'évolution temporelle peuvent bénéficier d'accélération exponentielles.

7.12 IMPLEMENTATION SUR ORDINATEURS QUANTIQUES : ETAT DES LIEUX, POSSIBILITES ET LIMITES

L'implémentation effective d'algorithmes de résolution d'EDP sur des ordinateurs quantiques est aujourd'hui un domaine de recherche actif, situé à la frontière entre la physique, les mathématiques appliquées et l'ingénierie logicielle quantique. Malgré des progrès rapides, les implémentations restent limitées par la maturité des machines actuelles et les exigences structurelles des algorithmes.

7.12.1 Possibilités actuelles

Encodeurs fonctionnels (état, opérateurs, métriques) :

¹⁴⁸ A noter que Les algorithmes variationnels, permettent d'explorer la résolution d'EDP linéaires par approximation sur circuits quantiques paramétrés. Leur intérêt réside dans leur compatibilité avec les machines. Néanmoins, ces approches restent heuristiques, sensibles à l'instabilité des gradients (barren plateaus) et sans garantie formelle de convergence.

¹⁴⁹ Bharti, Kishor et al. (2022). **Noisy intermediate-scale quantum (NISQ) algorithms**, *Reviews of Modern Physics*, vol. 94.

Les algorithmes quantiques supposent généralement que les données du problème (second membre, vecteurs de solution, opérateurs différentiels ou matrices issues de la discrétisation) sont encodées dans un espace d'état quantique. Cela requiert :

- Un **encodage efficace des vecteurs** (amplitude encoding, basis encoding, etc.)
- Une **implémentation unitaire des opérateurs linéaires** (block-encoding, simulation hamiltonienne)
- Une **préparation initiale des états** respectant les contraintes physiques (norme 1, normalisation, conditionnement)

Types d'algorithmes réalisables :

- **Algorithmes de type HHL** pour la résolution de systèmes linéaires issus des EDP discrétisées. Des démonstrations expérimentales ont été réalisées sur 2 à 5 qubits.
- **Algorithmes variationnels** comme **VQLS** ou **VQE appliqué à la mécanique quantique** pour approximer les solutions stationnaires.
- **Méthodes basées sur QSVT** ou **QSP** offrant un encodage matriciel plus souple et potentiellement plus stable numériquement, mais au prix de circuits plus profonds.
- **Encodages Fourier (QFT)** utilisés pour la représentation spectrale des solutions (méthodes pseudo spectrales, décomposition modale), mais encore rarement implémentés à l'échelle de problèmes réalistes.

Plateformes expérimentales disponibles :

- Les premières implémentations ont été faites sur IBM Q Experience, IonQ, Rigetti, Quantinuum ou Qiskit Aer.
- Les circuits déployés restent simples (petits réseaux, matrices 4×4 ou 8×8), mais ont permis des validations conceptuelles.

7.12.2 Limites et verrous technologiques

Taille des registres :

- L'encodage d'un vecteur de dimension N requiert en théorie $\log_2(N)$ qubits pour représenter ses composantes dans la base computationnelle. En pratique, la représentation des opérateurs associés (par block-encoding, ancillas ou contrôles) mobilise un nombre de qubits supplémentaire, ce qui augmente significativement la taille totale du registre requis.
- Pour résoudre des problèmes avec $N = 10^6$ (typique en mécanique des structures), il faudrait théoriquement plus de 20 qubits parfaitement fiables (hors de portée actuellement si l'on inclut la tolérance aux erreurs).

Profondeur des circuits :

- Les algorithmes HHL, QSP, ou block-encoding nécessitent de longues séquences de portes et de contrôles conditionnels, rendant leur implémentation sensible aux bruits (dépoléarisation, décohérence, erreurs de lecture).
- Même les algorithmes variationnels doivent maintenir la cohérence quantique durant de nombreux cycles de mesure-optimisation.

Conditionnement numérique :

- Les systèmes linéaires issus des EDP sont souvent **mal conditionnés**, ce qui amplifie les erreurs lors de l'inversion.
- Le conditionnement affecte la complexité du pré chargement des données et nécessite des techniques de **pré conditionnement quantique** encore théoriques ou peu testées.

Chargement des données (data loading) :

- Le goulot d'étranglement du chargement efficace des vecteurs classiques en état quantique est critique : le coût peut devenir linéaire en N , annulant l'avantage exponentiel attendu.
- L'approche LCU permet parfois d'optimiser cette étape, mais elle augmente le coût de circuit.

Ressources non standards :

- Certains algorithmes exigent des oracles, des registres auxiliaires ou des accès QRAM non encore disponibles à l'échelle expérimentale.

7.12.3 Vers des implémentations futures

- **Hybridation NISQ-classique** : en combinant les circuits quantiques courts avec une boucle d'optimisation classique, on peut résoudre des EDP simplifiées (1D, régimes stationnaires) via des approches variationnelles.
- **Preuve de concept sur cas jouets** : une tendance actuelle consiste à tester l'approche quantique sur des équations simples (Poisson 1D, Helmholtz sur un carré) pour explorer la scalabilité.
- **Benchmarking croisé** : des outils comme PennyLane, Qiskit ou QuTiP permettent de comparer les sorties quantiques avec les solveurs classiques sur les mêmes problèmes.

Aspect	Description	Plateformes / outils	Limites actuelles	TRL estimé
Encodage des vecteurs	Amplitude / basis encoding des données (source, CI)	Qiskit, PennyLane, Cirq	Chargement coûteux, préparation lente	3-4 (démonstrateurs)
Encodage des opérateurs	Block encoding, LCU, simulation hamiltonienne	Qiskit, QuTiP	Circuits profonds, matrices mal conditionnées	2-3
Solveurs quantiques linéaires	HHL, VQLS, QSVT	IBM Q, IonQ, Qiskit	Nombre de qubits, sensibilité au bruit	3 (proof-of-concept)
Préparation initiale	États préparés à partir de fonctions connues (test functions, normalisées)	Circuits paramétrés, PennyLane	Préparation difficile si fonction complexe	2-3
Méthodes variationnelles (VQLS, QPINN)	Résolution par optimisation hybride	PennyLane, Qiskit + classical optimizer	Convergence lente, landscape bruité	4 (premiers benchmarks)

QFT / décompositions spectrales	Bases de Fourier pour EDP linéaires	Simulateurs (Aer, qsim)	Profondeur de circuit, bruit élevé	2-3
Chargement de matrices	QRAM, oracle ou LCU pour matrices creuses	Modèles théoriques (QRAM), pas d'implémentation physique	Non réalisable à grande échelle	1-2 (spéculation)
Plateformes expérimentales	Machines NISQ actuelles, simulateurs	IBM Q, IonQ, Quantinuum, Rigetti	Peu de qubits logiques exploitables, forte décohérence	4 (expérimental)
Applicabilité industrielle	Cas tests jouets (Poisson 1D, Helmholtz)	Code ad hoc, Qiskit notebooks	Scalabilité non démontrée	2-3

Tableau 9 : Synthèse des méthodes et plateformes quantiques appliquées aux EDP : état actuel

À ce jour, l'implémentation d'un solveur EDP quantique complet sur une machine physique reste limitée à des **modèles réduits** ou à des **études de faisabilité**. Les principaux verrous sont liés à l'encodage, à la profondeur de circuit et à la précision numérique. Cependant, les **progrès continus en matière de compilation quantique, de réduction de bruit, de pré conditionnement et d'hybridation** pourraient ouvrir la voie, à moyen terme, à des solveurs quantiques exploitables pour des sous-problèmes industriels bien ciblés.

7.13 LES DIFFERENTS TYPES DE MACHINES

La mise en œuvre des algorithmes quantiques pour la résolution d'EDP dépend étroitement de l'architecture matérielle sous-jacente. En effet, les performances, la fiabilité et le type d'algorithmes envisageables varient fortement selon que l'on travaille avec des machines quantiques bruitées à court terme, des ordinateurs quantiques tolérants aux fautes, ou encore des dispositifs analogiques spécialisés. Chacune de ces classes d'architectures présente des avantages, des limitations et des exigences différentes en termes de modélisation et d'implémentation. Comprendre les caractéristiques de ces machines est essentiel pour évaluer la faisabilité et l'intérêt d'une approche quantique dans un contexte scientifique ou industriel.

7.13.1 NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum)

Définition : Terme introduit par John Preskill¹⁵⁰, NISQ désigne la génération actuelle de processeurs quantiques, disposant de 50 à quelques centaines de qubits, non-correctés d'erreurs.

Applications visées : Petites EDP paramétrées (1D ou 2D), résolution variationnelle ou approximation de fonctionnelle.

Avantages :

- Implémentables dès aujourd'hui.

¹⁵⁰ Preskill, J. (2018). **Quantum Computing in the NISQ era and beyond**. *Quantum*, 2, 79.

- Exploitent les circuits peu profonds (VQE, QAOA) avec fonctions d'essai paramétrées $u_\theta(x)$.
- Résolution variationnelle de l'équation de Poisson ou de Schrödinger à travers une minimisation de fonctionnelles d'énergie.

Limites :

Les dispositifs NISQ, disponibles aujourd'hui, permettent **d'exécuter des circuits quantiques sur quelques centaines de qubits physiques**, sans correction d'erreur complète. Ces machines, bien que limitées en profondeur de circuit, ont suscité un intérêt croissant pour l'approximation de solutions d'EDP par des **méthodes variationnelles hybrides**.

Dans ces schémas, **l'ordinateur quantique sert à évaluer des fonctions de coût ou d'énergie**, tandis que **l'optimisation des paramètres est effectuée classiquement**.

Cependant, ces approches souffrent de plusieurs limites fondamentales.

- Sensibles au bruit : nombre limité de couches et de paramètres optimisables.
- Taille d'EDP restreinte, pas de scalabilité garantie¹⁵¹.
- Pas d'accès direct à des objets de type champ continu, nécessite discrétisation.

De plus, l'encodage initial des données du problème, comme les conditions aux limites, la géométrie du domaine ou les coefficients de l'EDP, reste lourd et peu scalable. Surtout, la récupération de la solution (souvent un champ sur un domaine) nécessite un grand nombre de mesures répétées, qui dégradent significativement les performances. Ce goulet d'étranglement I/O est aggravé par la faible expressivité des circuits disponibles et par la variabilité inhérente aux mesures quantiques.

En pratique, il est très difficile d'obtenir une représentation globale ou même locale précise de la solution. Ainsi, malgré des preuves de concept intéressantes sur des cas très simplifiés, l'utilisation des dispositifs NISQ pour résoudre des EDP réalistes reste largement expérimentale.

Exemple :

Utilisation de la méthode **VQE-PDE** (Variational Quantum Eigensolver for PDE) où l'objectif est de minimiser une fonctionnelle de type énergie :

$$\mathcal{L}[\psi] = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla \psi(x)|^2 - f(x)\psi(x) \right) dx$$

approchée par un circuit quantique paramétré ψ_θ ¹⁵².

7.13.2 FTQC (Fault-Tolerant Quantum Computing)

Définition : Calcul quantique corrigé d'erreur, avec des qubits logiques et des architectures stabilisées.

Avantages théoriques :

- Implémentation d'algorithmes à complexité exponentiellement réduite comme **HHL** (Harrow-Hassidim-Lloyd) pour la résolution de systèmes linéaires $Ax = b$.
- Possibilité de résolution directe d'EDP linéaires discrétisées, en exploitant les matrices issues des schémas éléments finis ou volumes finis.

¹⁵¹ Arrasmith, A. (2021). *Effective learning rates in parametrized quantum circuits*. *Quantum*.

¹⁵² Li, Y. (2021). *Quantum Variational Algorithms for Solving Partial Differential Equations*. *Physical Review Research*.

Limites :

Le calcul quantique tolérant aux fautes repose sur l'utilisation de qubits logiques corrigés d'erreurs, capables d'exécuter des algorithmes complexes de manière fiable. Ce cadre ouvre, en théorie, la voie à **des accélérations significatives pour certains problèmes liés aux EDP**, notamment via des algorithmes quantiques pour la résolution de systèmes linéaires issus de discrétisations numériques. Cependant, ces promesses se heurtent à **plusieurs obstacles structurels**.

D'une part, les **contraintes liées au conditionnement des matrices**, à la préparation efficace des états d'entrée et à la récupération des résultats compliquent fortement l'application à des cas réalistes.

D'autre part, **le goulet d'étranglement des I/O** constitue un verrou majeur : les algorithmes quantiques requièrent que l'information soit encodée de manière quantique en entrée et lue sous forme classique en sortie, ce qui est très coûteux en temps et en ressources, surtout lorsque les solutions recherchées sont de nature globale (champs, vecteurs, distributions). Ce point est particulièrement critique dans les problèmes liés aux EDP, où **le coût du transfert de données peut éclipser tout gain algorithmique potentiel**.

Enfin, **les exigences matérielles en termes de qubits physiques restent à ce jour hors de portée**, même dans les projections les plus optimistes et repoussent la faisabilité industrielle à un horizon au-delà de la prochaine décennie.

Exemple :

Résolution de $\Delta u = f$ par la méthode HHL en représentant la matrice discrétisée de Laplace sur une base de qubits logiques. Accès à l'amplitude $\langle x|u \rangle$ mais extraction du champ complet coûteuse (problem of quantum output)¹⁵³. Même en supposant une résolution efficace, la lecture du champ solution complet reste un goulot d'étranglement majeur. Seules certaines observables ou fonctionnelles sont accessibles sans explosion du nombre de mesures. Cela limite fortement les cas d'usage où une reconstruction complète est nécessaire.

7.13.3 Analogique (quantum simulators)

Définition : Systèmes physiques (pièges à ions, réseaux d'atomes froids) qui simulent directement une EDP ou un Hamiltonien correspondant.

Avantages :

- Simulent dynamiquement des EDP non linéaires ou fortement couplées (notamment Schrödinger non linéaire).
- Moins sensibles aux erreurs de mesure que les approches NISQ ou FTQC.

Limites :

Le calcul quantique analogique, fondé sur la **simulation directe d'une dynamique physique équivalente à l'EDP visée**, offre une autre voie prometteuse. Des simulateurs quantiques peuvent, en principe, **reproduire l'évolution temporelle de systèmes décrits par des équations différentielles**. Cette approche permet d'éviter certaines couches d'abstraction algorithmique propres aux dispositifs numériques.

Toutefois, ici encore, **les défis liés à l'input/output sont majeurs**. D'une part, **préparer un état initial** qui corresponde à une configuration classique bien définie du problème **n'est pas trivial** ; d'autre part,

¹⁵³ Childs. (2017). **Quantum Algorithm for Linear Systems of Equations**. *SIAM J. Comp.*

extraire des informations précises de l'évolution du système **requiert des mesures adaptées souvent limitées à des observables spécifiques**.

De plus, ces dispositifs **ne permettent généralement pas d'accéder à une reconstruction complète et fiable de la solution**, ce qui limite leur applicabilité pour des tâches d'ingénierie ou de modélisation où des quantités locales ou globales doivent être précisément évaluées.

- Spécifiques à une classe de problèmes (e.g. équations de type Schrödinger ou Gross-Pitaevskii).
- Programmabilité très limitée, difficile à généraliser.

En l'absence de schéma systématique d'approximation ou de contrôle d'erreur, ces approches restent pour l'instant cantonnées à des domaines où la structure physique du problème est proche de celle du simulateur.

Exemple :

Simulation analogique de l'équation de Schrödinger non linéaire avec interactions dipolaires via un condensat de Bose-Einstein. La densité $|\psi(x, t)|^2$ correspond au champ simulé^{154 155}.

7.13.4 Avantage FTQC/LSQ et NISQ

HHL, QSVT/QSP et la simulation hamiltonienne nécessitent l'ordinateur quantique FTQC / LSQ pour adresser de manière fiable les problèmes industriels à grande échelle.

A l'heure actuelle, sur les machines quantiques NISQ, on peut utiliser les approches variationnelles VQA, le recuit quantique, le QMC, le QML, le QLBM, ainsi que d'autres méthodes, que les équations soient linéaires ou non linéaires :

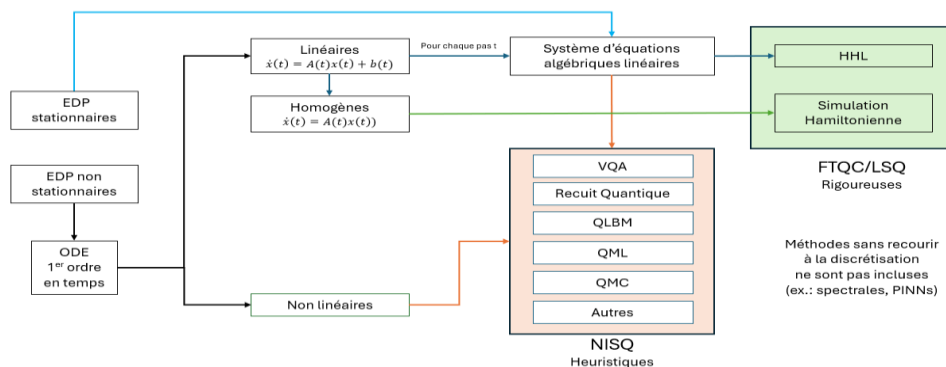


Figure 18 : Approches quantiques possibles en fonction du type d'EDP

Les méthodes VQA, QMC, QLBM et le recuit quantique sont des approches heuristiques. Leurs avantages quantiques sont contextuels et dépendent des spécificités du problème et des capacités des systèmes quantiques utilisés.

L'algorithme HHL offre une accélération exponentielle pour résoudre des systèmes d'équations linéaires lorsque les matrices sont creuses et bien conditionnées. Cependant, il y a des défis importants liés à la préparation de l'état quantique initial et à l'extraction de la solution à partir de l'état quantique

¹⁵⁴ Cirac, J. I. (2012). **Goals and opportunities in quantum simulation**. *Nature Physics*, 8, 264–266.

¹⁵⁵ Bloch, I. (2008). **Many-body physics with ultracold gases**. *Reviews of Modern Physics*, 80(3), 885–964.

final. Ces défis peuvent annuler une partie de l'avantage quantique¹⁵⁶. La simulation hamiltonienne peut offrir une accélération exponentielle pour des problèmes spécifiques.

Il est possible de résoudre certaines EDP sans recourir à la discrétisation mais ces méthodes (par exemple : méthodes spectrales, PINNs) sont généralement limitées à des cas spécifiques. Ce cas de figure n'est pas considéré dans ce paragraphe.

7.14 METHODES HYBRIDES QUANTIQUE-CLASSIQUE

Les méthodes hybrides combinent traitements classiques et quantiques afin de tirer parti des atouts de chaque paradigme : robustesse algorithmique côté classique, potentiel d'accélération et d'expressivité du côté quantique. Cette approche s'avère essentielle dans un contexte NISQ, notamment pour la résolution d'EDP complexes, où la distribution efficace des tâches computationnelles devient un levier stratégique.

Cas d'usage où l'hybridation est nécessaire :

- **Problèmes variationnels complexes :** Le VQE permet d'approximer des états propres d'opérateurs (Hamiltoniens) issus de discrétisations d'EDP linéaires ou non linéaires. Les circuits quantiques calculent les espérances d'énergie, tandis qu'un optimiseur classique ajuste les paramètres variationnels. Cette hybridation est particulièrement adaptée à la résolution de problèmes spectraux issus de formulations variationnelles d'EDP¹⁵⁷.
- **EDP stochastiques ou multi-échelles :** Les équations aux dérivées partielles définies sur des structures multi-échelles (biomécanique, géophysique, finance quantitative) posent des défis liés à la propagation d'incertitudes et à la séparation d'échelles. L'hybridation permet d'utiliser des méthodes classiques (multigrilles, homogenization, sparse grids) couplées à des solveurs quantiques locaux sur les sous-domaines critiques (fortes hétérogénéités). Ces méthodes sont explorées dans le cadre des schémas *domain decomposition* quantiques¹⁵⁸.
- **Méthodes Monte Carlo quantiques :** Le *Quantum Amplitude Estimation* (QAE) permet de quadratiser la convergence des méthodes Monte Carlo classiques. En combinant QAE avec des échantillonneurs classiques, il devient possible d'approximer des intégrales intervenant dans les formulations faibles d'EDP stochastiques ou dans la simulation de prix d'options complexes¹⁵⁹. Cela a été testé par IBM et JP Morgan dans le cadre de la valorisation de produits dérivés exotiques.
- **Problèmes inverses et optimisation sous contrainte :** Dans les problèmes inverses régis par des EDP (imagerie médicale, prospection géophysique, identification de paramètres de modèles), une boucle hybride permet d'utiliser des solveurs quantiques pour l'exploration de l'espace des paramètres (via QAOA ou VQE), tandis que l'ajustement des contraintes physiques ou statistiques reste classique.

L'hybridation classique–quantique est une stratégie réaliste dans un contexte NISQ mais reste limitée à des cas très spécifiques (problèmes spectraux localisés, formulation variationnelle bien posée). Elle ne constitue pas une solution générale pour toutes les EDP multi-échelles ou stochastiques.

Technologie et architecture :

¹⁵⁶ Ce point est détaillé dans la section traitant de la gestion de l'output.

¹⁵⁷ Peruzzo, A., (2014). **A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor.** *Nature Communications*.

¹⁵⁸ Andrew M. (2020), **High-precision quantum algorithms for partial differential equations.** *arXiv preprint*

¹⁵⁹ Stamatopoulos, N. (2020). **Option pricing using quantum computers.** *Quantum*.

Les architectures hybrides sont souvent organisées en boucles synchrones (comme dans les VQE classiques) ou en traitements distribués avec accès mémoire partagé. La latence de communication, la bande passante et l'optimisation des interfaces (classique $\leftrightarrow$ quantique) sont des facteurs critiques. Des outils comme *Qiskit Runtime* (IBM), *PennyLane Lightning* (Xanadu) ou *TensorCircuit* (Tsinghua) visent à améliorer cette cohabitation, en intégrant des primitives hybrides de plus en plus performantes^{160 161 162 163164}.

Pourquoi l'hybridation est nécessaire ?

L'idée d'hybrider une méthode classique (comme la méthode des éléments finis - FEM) avec un module quantique prend son sens dans les cas où les méthodes classiques rencontrent des limitations soit en précision, soit en complexité computationnelle, notamment dans certaines zones localisées du domaine de calcul.

Pourquoi les méthodes classiques (FEM, FVM, etc.) peuvent avoir des difficultés ?

Donnons deux exemples de cas d'usage pour illustrer le pourquoi.

- Dans le cas de la résolution des équations de Navier-Stokes, certaines zones comme les couches limites, séparations de flux ou zones de turbulence sont très difficiles à modéliser précisément à cause de la forte non-linéarité ou turbulence. Les solveurs classiques ont besoin d'un maillage très fin et de pas de temps très courts, ce qui coûte énormément en calcul. Le fluide peut présenter des structures à différentes échelles spatiales et temporelles (vortex, tourbillons fins, etc.), ce qui rend difficile leur résolution uniforme dans tout le domaine. Enfin, les méthodes classiques deviennent instables ou nécessitent des schémas numériques complexes (stabilisation SUPG, schémas implicites, etc.).
- Dans les systèmes à plusieurs corps (many-body), les solveurs classiques se révèlent souvent inefficaces. En particulier, ils peinent à capturer les effets de corrélation électronique forte, pourtant essentiels pour décrire avec précision le comportement des systèmes quantiques. « La nature n'est pas classique, bon sang ! Et si vous voulez simuler la nature, vous feriez mieux de la faire mécaniquement quantique », comme l'a dit Richard Feynman dans les années 1980.

On y ajoute deux autres raisons :

- Les ordinateurs quantiques actuels (NISQ) sont encore limités en taille et précision.
- L'hybridation permet de tirer parti de la force de chaque paradigme : le quantique pour étudier les zones complexes, le classique pour étudier les zones relativement plus simples et manipuler de gros volumes de données classiques¹⁶⁵.

¹⁶⁰ McClean, J. R., et al. (2016). *The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms*. *Nature Communications*.

¹⁶¹ Stamatopoulos, N., et al. (2020). *Option Pricing using Quantum Computers*. *Quantum*.

¹⁶² Bausch, J., et al. (2021). *Domain Decomposition with Quantum Resources*. *PRX Quantum*, 2(3), 030303.

¹⁶³ Yamamoto, N., et al. (2021). *Quantum approach to inverse problems in scattering*. *NPJ Quantum Information*, 7, 148.

¹⁶⁴ Kandala, A., et al. (2017). *Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets*. *Nature*, 549, 242–246.

¹⁶⁵ A noter que l'hybridation permet de tirer parti de la complémentarité entre les deux paradigmes : les modules quantiques peuvent potentiellement accélérer certaines parties strictement linéaires du calcul (inversion de matrices, simulation hamiltonienne, recherche d'états propres), tandis que les méthodes classiques restent indispensables pour traiter les non-linéarités, les couplages multi-physiques et la gestion de grands volumes de données. Il est important de souligner qu'à l'heure actuelle, aucun avantage théorique n'a été démontré pour la résolution directe de problèmes non linéaires en quantique. Cette difficulté est liée à plusieurs facteurs : la nature intrinsèquement linéaire de la mécanique quantique, le théorème de non-clonage, ainsi que les contraintes associées aux approches itératives nécessitant des opérations de mesure à chaque pas temporel. Dans ces situations, les informations extraites doivent être traitées classiquement avant d'être

Une approche hybride pourrait consister à coupler un solveur classique par éléments finis (FEM) à un module quantique afin de résoudre l'équation de Schrödinger dans le cas d'un potentiel localisé complexe. Ce type de potentiel peut induire des variations rapides ainsi que des discontinuités spatiales, ce qui nécessite un maillage extrêmement fin, sans pour autant permettre de capturer efficacement les effets de corrélation électronique. Dans une telle approche, le solveur FEM traiterait les régions où le potentiel est régulier, tandis qu'un solveur quantique (par exemple basé sur l'algorithme VQE) serait utilisé pour analyser les zones critiques où les effets quantiques et les corrélations électroniques jouent un rôle majeur.

Une approche hybride, combinant solveurs classiques (ex. éléments finis) et modules quantiques locaux (ex. VQE), peut être pertinente pour certains cas à corrélations fortes. Cependant, cette stratégie reste encore sans preuve que l'avantage quantique compense les surcoûts d'intégration, de calibration et de couplage. Elle nécessite des architectures bien coordonnées et une bonne maîtrise des interfaces numériques pour être utile.

Il est alors possible de distinguer plusieurs classes d'approches selon le niveau de maturité technologique et la nature du hardware :

Classe	Nom	Exemples	Horizon	Avantages	Limites actuelles
NISQ	Noisy Intermediate-Scale Quantum	VQE, QAOA, Quantum PINNs	Court terme (0-5 ans)	Déjà utilisables sur hardware actuel, hybrides	Faible nombre de qubits, erreurs
FTQC	Fault-Tolerant Quantum Computing	HHL, QPE	Moyen terme (5-10 ans)	Algorithmes quantiques exacts, scalable	Besoin de qubits logiques, correction d'erreur
FFT	Fully Fault-Tolerant	QLSA + circuits logiques complexes	Long terme (10+ ans)	Précision, complexité élevée	Pas encore réalisable
Analogique	Quantum Simulators	Boson sampling, simulateurs optiques	Court à moyen terme	Efficaces pour des cas spécifiques	Moins universels

Tableau 10 : Classification des algorithmes quantiques (Preskill, 2018)

Dans son article, Preskill introduit la notion de "Megaquop" pour désigner les capacités futures de machines quantiques capables de manipuler 10^6 opérations quantiques cohérentes, ce qui permettrait d'aborder de vrais problèmes EDP complexes.

Objectif à court terme : Atteindre une supériorité quantique fonctionnelle sur des EDP à faible dimension et fortement structurées (e.g. Schrödinger 1D non-linéaire).

Objectif à moyen terme : Coupler des solveurs quantiques spécialisés avec des plateformes HPC pour attaquer des EDP en physique statistique ou en dynamique des fluides compressibles.

réinjectées dans le circuit, ce qui limite fortement la possibilité d'obtenir une accélération globale par des approches hybrides quantique-classique.

7.14.1 Cas où le quantique apporte un avantage réel

Les méthodes quantiques ne remplacent pas systématiquement les solveurs classiques mais elles procurent un gain asymptotique décisif dès que la discrétisation conduit à :

1. Une dimension effective élevée (curse-of-dimensionality) ;
2. Un opérateur parcimonieux (sparse) et hermitien, ou block-encodable à coût quasi-linéaire ;
3. Un maillage structuré (grille régulière, tuilage tensoriel, etc.).

Point clé : Si le maillage est bien structuré, rafraîchir la résolution spatiale (c'est-à-dire diviser par deux le pas h) fait passer la taille classique d'un système de N inconnues à $c^d N$ (avec $c = 2^d$ en dD), tandis que le nombre de qubits n'augmente que linéairement :

$$n \rightarrow n + \log_2(c) = n + d,$$

ce qui confère un avantage exponentiel en mémoire et, sous hypothèses de conditionnement contrôlé, en temps de calcul.

Algorithmes de simulation hamiltonienne pour les équations de diffusion :

Pour les EDP paraboliques (diffusion thermique, chimie, finance) dont l'opérateur discrétisé est un Laplacien généralisé ou une matrice de M-matrice :

- **Schrödingerisation :** le pas de temps imaginaire $\exp(-A \tau)$ est transcrit en évolution unitaire via la dilation hermitienne $\tilde{H} = \begin{pmatrix} 0 & A \\ A & 0 \end{pmatrix}$.
- **Simulation hamiltonienne efficace :**
 - **Trotter-Suzuki** haut ordre si chaque terme agit localement ;
 - **Qubitisation + QSVT** si un block-encoding à facteur d'échelle polylogarithmique est disponible.
- **Extraction d'observables ou inversion :**
 - **QSVT** applique la fonction $f(\lambda) = e^{-\lambda \tau}$ ou directement sur le spectre ;
 - **HHL** récupère un état $|x\rangle = A^{-1}|b\rangle$ utile pour les schémas implicites.

Le nombre d'appels à l'unitaire encodant A se borne alors à $\mathcal{O}(\kappa \text{polylog}(N/\epsilon))$ où κ est le conditionnement régularisé et ϵ la précision cible.

A noter que les algorithmes de simulation hamiltonienne basés sur QSVT ou qubitisation offrent des réductions asymptotiques de complexité dans des cas spécifiques (opérateurs parcimonieux, conditionnement maîtrisé, accès oracle). En dehors de ces cas, le surcoût d'encodage ou les erreurs cumulées peuvent annihiler le gain théorique.

Réduction exponentielle de la complexité pour certaines classes d'EDP :

Critère	Solveur classique	Résolution quantique (idéal FTQC)
Mémoire	$\mathcal{O}(n)$ à $\mathcal{O}(n^d)$ flottants selon la dimension spatiale d	$\mathcal{O}(n + d)$ qubits
Temps	$\tilde{\mathcal{O}}(N^{3/2})$ à $\tilde{\mathcal{O}}(N^3)$ selon le conditionnement et la dimension du maillage	—
Temps — schéma implicite (CG/GMRES)	Itérations	$\tilde{\mathcal{O}}\left(\kappa \cdot \text{poly log}\left(\frac{n}{h}\right)\right)$ queries
Cas typiques	Diffusion en 6-D, pricing haute dimension, cinétique des plasmas	Idem, mais avec maillage raffiné sans explosion mémoire

Tableau 11 : Comparaison des coûts classiques et quantiques (FTQC) pour la résolution d'EDP

Sous réserve :

- Matrice **s-parcimonieuse** avec $s = \text{polylog}(N)$;
- Pré conditionneur quantique ou hermitianisation à coût polylog ;
- Post-processing limité à quelques observables (ex. moments, intégrales), évitant la lecture classique complète de $|x\rangle$.

En résumé, **l'avantage réel apparaît lorsque le raffinement spatial classique impose une croissance exponentielle en mémoire et en FLOP**, tandis que la représentation quantique, grâce à la superposition et à l'encodage en amplitude, ne subit qu'une progression linéaire en qubits et polylogarithmique en temps de circuit (à condition que l'opérateur satisfasse les hypothèses structurelles ci-dessus).

Ainsi, **l'un des avantages les plus significatifs des approches quantiques dans la résolution des EDP** réside dans leur capacité à **représenter efficacement des maillages de grande finesse**. En effet, lorsqu'un maillage spatial est structuré de manière adéquate, le coût associé à la division par deux de la distance entre les points du maillage (raffinement de la discrétisation spatiale) croît de façon **exponentielle avec les méthodes classiques, la représentation quantique peut, dans certains cas idéalisés** (maillage régulier, opérateur bien structuré, matrice block-encodable), **évoluer linéairement avec le nombre de qubits**. Toutefois, **cette scalabilité théorique repose sur des hypothèses très restrictives** et le coût réel inclut également l'encodage, la lecture de sortie et les erreurs de circuit, souvent non négligeables.

Ce comportement ouvre la voie à des **simulations de haute résolution dans des espaces de grande dimension**, ce qui serait inabordable avec des ressources classiques. C'est dans ce contexte que le traitement quantique permet un gain de complexité remarquable, notamment pour les problèmes à forte structure et à géométrie régulière.

7.14.2 Difficultés d'implémentation sur des machines actuelles

Malgré les perspectives théoriques prometteuses de l'informatique quantique pour la résolution des équations aux dérivées partielles (EDP), plusieurs verrous technologiques limitent aujourd'hui une mise en œuvre concrète à grande échelle. Les principales difficultés sont :

- **Nombre limité de qubits et temps de cohérence réduit** : Les architectures actuelles disposent de quelques centaines de qubits physiques, dont une fraction seulement peut être exploitée comme qubits logiques dans les algorithmes de simulation. Par ailleurs, le temps de cohérence reste trop

court pour exécuter des circuits profonds impliquant de nombreuses opérations élémentaires. Cela restreint la complexité des EDP simulables en pratique.

- **Bruit et erreurs de lecture** : Les ordinateurs quantiques NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) sont sujets à des erreurs de porte, de mesure et de décohérence. Cela affecte la stabilité et la fidélité des simulations d'EDP, en particulier lors de l'estimation de valeurs propres ou d'observables à haute résolution.
- **Contraintes sur l'accès à l'output (voir section ci-dessous)** : L'un des obstacles majeurs à l'utilisation des approches quantiques dans la résolution des EDP réside dans l'extraction de la solution complète depuis l'état quantique. Lorsque la solution varie peu spatialement, les probabilités de mesure deviennent presque uniformes, rendant l'échantillonnage inefficace. Cela implique un coût exponentiel pour reconstruire le champ dans son ensemble, ce qui rend la méthode impraticable dans ces cas. De plus, l'extraction de l'information à partir du registre quantique constitue un goulot d'étranglement. Même si l'algorithme fournit une solution encodée efficacement dans un état quantique, l'obtention de cette solution sous forme classique nécessite un grand nombre de mesures, notamment pour reconstruire des champs ou des distributions issus des solutions d'EDP.
- **Complexité des mappings EDP** : La complexité des mappings pour les EDP n'est pas un obstacle structurel. Au contraire, la structure locale et parcimonieuse des matrices issues de leur discrétisation permet un encodage efficace via des méthodes comme le block-encoding ou LCU. Le nombre d'opérateurs et d'opérations par opérateur croît lentement avec la taille du système, ce qui rend le mapping particulièrement avantageux pour les grandes dimensions, tant que les conditions aux limites sont bien gérées.

7.15 PROBLEME DE L'OUTPUT D'UN CALCUL QUANTIQUE SUR UNE EDP

L'un des défis majeurs dans la simulation quantique des EDP réside dans la lecture et l'extraction d'information à partir de l'état quantique final, phénomène communément désigné sous le nom de problème de l'output. Cette difficulté est amplifiée par la nature probabiliste de la mesure quantique et la structure souvent complexe des solutions aux EDP.

Différenciation entre champ complet et fonctionnelles sur le champ :

La solution d'une EDP est généralement un champ continu ou discret sur un domaine spatial ou fréquentiel, que l'on souhaite souvent récupérer sous forme de vecteur d'amplitudes dans l'espace quantique. Or, obtenir la reconstruction complète du champ à partir de l'état quantique nécessite un grand nombre de mesures répétées. Une tâche coûteuse en termes de ressources et de temps notamment lorsque la dimension de l'espace d'état est élevée¹⁶⁶.

Pour contourner cette difficulté, la majorité des algorithmes quantiques privilégient l'estimation de fonctionnelles spécifiques sur le champ, telles que :

- L'intégrale de la solution, par exemple pour calculer des flux ou des grandeurs moyennes.
- Les normes ou moments statistiques (moyenne, variance).
- Les valeurs maximales ou minimales sur une zone d'intérêt.

Ces quantités peuvent être extraites à moindre coût grâce à des techniques telles que l'estimation d'amplitude (Amplitude Estimation) ou les algorithmes d'estimation de moyenne quadratique

¹⁶⁶ Montanaro, A. (2016). **Quantum algorithms: an overview**. *npj Quantum Information*, 2, 15023.

(Quantum Mean Estimation), qui réduisent la complexité quadratique des méthodes classiques à une complexité polynomiale en log de la taille du système¹⁶⁷.

Coût de la lecture statistique en présence de faibles variations :

Le vrai défi du problème de l'output se manifeste lorsque la solution présente de faibles variations locales autour d'une valeur moyenne globale, une situation fréquente dans des EDP modélisant des phénomènes diffusifs, thermiques ou mécaniques à faible contraste spatial. Dans ce contexte, la probabilité associée aux amplitudes diffère très peu d'une région à l'autre, ce qui implique :

- Un faible signal statistique lors de la mesure.
- Une nécessité de répéter l'expérience un très grand nombre de fois afin d'obtenir des estimations fiables et significatives.

Cela conduit à un coût exponentiel ou quasi-exponentiel en termes de répétitions de mesure, limitant fortement la praticabilité des approches quantiques pour la récupération exhaustive du champ.

Avantage dans la détection de zones fortement contraintes :

Inversement, si la solution présente des zones spatialement localisées où l'amplitude est nettement supérieure à la moyenne, ces régions se traduisent par une forte densité de probabilité dans l'état quantique. Ainsi, la mesure statistique concentre naturellement ses résultats sur ces zones critiques, permettant une détection efficace et rapide.

Cette propriété a été étudiée dans le contexte des problèmes quantiques de détection et de localisation, où la forte concentration de probabilité permet d'extraire efficacement des caractéristiques importantes de la solution^{168 169}.

Elle est particulièrement intéressante dans le cadre des EDP appliquées à la mécanique des milieux continus, la modélisation des matériaux hétérogènes ou la physique des plasmas, où l'identification de défauts, de zones de contraintes ou de phénomènes singuliers est cruciale¹⁷⁰.

Perspectives d'optimisation locale et hybridation :

L'approche pragmatique consiste donc à utiliser la plateforme quantique comme un outil de détection et de localisation prioritaire, ciblant des sous-domaines où les amplitudes sont significativement élevées, plutôt que de tenter la reconstruction intégrale du champ. Une fois ces zones identifiées, des méthodes classiques ou hybrides peuvent affiner la solution dans ces régions.

Cette stratégie hybride, combinant un prétraitement quantique focalisé et une post-traitance classique, permet de tirer parti du meilleur des deux mondes et réduit considérablement le coût global du calcul¹⁷¹.

Techniques avancées d'extraction d'information quantique :

1. **Shadow tomography :** La *shadow tomography* est une technique récente permettant d'estimer un grand nombre d'observables à partir d'un nombre de mesures bien moindre

¹⁶⁷ Brassard, 2000. **Quantum Amplitude Amplification and Estimation** <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0005055>

¹⁶⁸ S. Tacchella, (2017). **Dust attenuation, bulge formation and inside-out cessation of star-formation in Star-Forming Main Sequence galaxies at $z \sim 2$** <https://arxiv.org/abs/1704.00733>

¹⁶⁹ Chia, A (2015). **Coherent chemical kinetics as quantum walks I: Reaction operators for radical pairs** <https://arxiv.org/abs/1506.04213>

¹⁷⁰ **Randomized Quaternion Singular Value Decomposition for Low-Rank Approximation** <https://arxiv.org/abs/2011.03368>

¹⁷¹ Sung Won Ahn, (2015). **Quenched central limit theorem rates of convergence for one-dimensional random walks in random environments** <https://arxiv.org/abs/1704.03020>

qu'avec la tomographie complète, en construisant un « ombre » efficace de l'état quantique¹⁷². Appliquée aux EDP, elle pourrait permettre d'extraire simultanément plusieurs fonctionnelles locales du champ, sans coût exponentiel en répétitions.

2. **Tomographie compressive** : Cette méthode combine la tomographie quantique avec des techniques de compressive sensing, exploitant la **sparsité** ou la **structure faible dimensionnelle** des états quantiques représentant la solution d'une EDP¹⁷³. Elle permet une reconstruction plus rapide et moins coûteuse, en particulier dans les cas où la solution possède une représentation compacte dans une base adaptée (wavelets, polynômes orthogonaux).
3. **Techniques hybrides et apprentissage machine** : L'intégration d'algorithmes d'apprentissage machine, notamment les réseaux neuronaux quantiques (QNN) et les modèles hybrides quantique-classique, ouvre la voie à des méthodes d'approximation et d'extraction adaptative des solutions d'EDP. Par exemple, un QNN peut être entraîné pour prédire des caractéristiques spécifiques de la solution à partir d'un nombre limité de mesures¹⁷⁴.

Ces techniques avancées de shadow tomography (ou de tomographie compressive) offrent des moyens prometteurs pour extraire plusieurs observables d'un état quantique sans nécessiter un grand nombre de mesures. Toutefois, ces méthodes sont encore peu appliquées aux EDP complexes et nécessitent des conditions spécifiques sur la structure des solutions (creusé, bases adaptées).

7.16 LIMITATIONS ET DEFIS ACTUELS DES APPROCHES QUANTIQUES

Malgré les avancées théoriques significatives et les premiers résultats expérimentaux encourageants, l'implémentation quantique de méthodes de résolution demeure aujourd'hui confrontée à plusieurs limitations majeures.

Le premier défi réside dans les **contraintes intrinsèques des machines NISQ** (Noisy Intermediate-Scale Quantum), actuellement les seules plateformes quantiques accessibles. Ces architectures, bien que prometteuses, souffrent d'un **nombre limité de qubits physiques**, d'une **cohérence temporelle courte** et d'un **taux d'erreur par porte non négligeable**, ce qui limite la profondeur et la fiabilité des circuits réalisables. Ces caractéristiques imposent des compromis entre précision, temps de calcul et complexité algorithmique, réduisant la pertinence de nombreuses approches pourtant puissantes sur le plan asymptotique.

Un second axe critique concerne la **gestion du bruit quantique**. Pour assurer la fidélité des calculs dans des régimes où la stabilité numérique est cruciale (comme dans la simulation de systèmes physiques issus d'EDP hyperboliques ou de type advection-diffusion), il est indispensable d'**introduire des mécanismes de correction d'erreur quantique**. Or, l'intégration de tels codes correcteurs, que ce soit dans des régimes de **tolérance aux fautes (FTQC)** ou via des techniques adaptatives sur NISQ (comme les *error mitigation strategies*), augmente considérablement la surcharge en qubits et la complexité opérationnelle.

Enfin, au-delà des limites matérielles, des **verrous algorithmiques** subsistent. La préparation des états, l'encodage des opérateurs linéaires ou encore le conditionnement des matrices discrétisées constituent des goulets d'étranglement computationnels. Dans les cas linéaires bien conditionnés, **des algorithmes comme HHL ou QSVT offrent un potentiel théorique de réduction exponentielle mais au prix de prérequis rarement réunis dans des EDP réalistes**. Les approches variationnelles (VQLS,

¹⁷² Sami Abu-El-Haija, (2017). Watch Your Step: Learning Node Embeddings via Graph Attention <https://arxiv.org/abs/1710.09599>

¹⁷³ David Gross, (2010). Quantum state tomography via compressed sensing <https://arxiv.org/abs/0909.3304>

¹⁷⁴ Seonhoon Kim, (2018) Semantic Sentence Matching with Densely-connected Recurrent and Co-attentive Information <https://arxiv.org/abs/1805.11360>

QPINN) sont plus tolérantes aux erreurs mais souffrent de problèmes d'optimisation classiques dans les circuits paramétrés (paysages plats, bruit sur les gradients).

7.17 RESOLUTION D'EDP PAR VOIE QUANTIQUE : CONCLUSION

Ce chapitre a proposé une analyse approfondie des perspectives et des obstacles liés à l'utilisation de l'informatique quantique pour la résolution d'équations aux dérivées partielles (EDP). Il ressort que les algorithmes quantiques, bien que puissants sur le plan théorique, requièrent des conditions matérielles, structurelles et numériques encore hors de portée dans de nombreux cas concrets. Leur promesse principale réside dans la **réduction de la complexité computationnelle pour des classes spécifiques de problèmes mal adaptés aux méthodes classiques** : haute dimension, structure fortement non locale, systèmes couplés ou inversement posés.

À court et moyen termes, les efforts de recherche doivent s'orienter vers des **modèles hybrides** exploitant conjointement les capacités des processeurs classiques et quantiques. Ce paradigme permet d'**avoir le meilleur des deux mondes** : la robustesse, la maturité numérique et la richesse des bibliothèques classiques (éléments finis, multigrille, solveurs linéaires), combinées à la puissance de traitement potentielle des modules quantiques pour des tâches ciblées à forte complexité (inversion de matrices mal conditionnées, estimation de valeurs propres, accélération de solveurs variationnels). Cette complémentarité rend possible une intégration progressive et pragmatique du quantique dans les chaînes de calcul existantes.

À plus long terme, l'émergence de plateformes FTQC permettra de stabiliser ces méthodes et d'envisager des cas d'usage industriels à forte valeur ajoutée. Pour accélérer cette transition, **la mutualisation des efforts** est essentielle. Elle passe par la structuration de communautés intersectorielles autour de plateformes logicielles ouvertes (Qiskit, PennyLane, Tequila, etc.), le partage de benchmarks standards pour les EDP quantiques, et la mise en place de **bancs d'essai collaboratifs** entre chercheurs académiques, fournisseurs de technologies quantiques et grands groupes utilisateurs (aéronautique, énergie, climat, finance, défense, etc.).

L'avenir de la simulation quantique d'EDP dépendra donc de notre capacité collective à articuler rigueur scientifique, innovation algorithmique, progrès technologique et **vision stratégique partagée**. Cette convergence d'intérêts et de compétences constitue un levier majeur pour faire des EDP un terrain d'application prioritaire de l'informatique quantique au XXI^e siècle.

8. LE POTENTIEL DES RESEAUX DE TENSEURS POUR LES EDP

Depuis quelques années, de nouvelles approches « classiques » se développent en parallèle des méthodes quantiques. Dans ce chapitre, nous présenterons quelques approches qui semblent très prometteuses.

8.1 RESEAUX DE TENSEURS

Les réseaux de tenseurs sont des structures algébriques et graphiques permettant de représenter des tenseurs de grande dimension à l'aide de leur factorisation sous forme de produits contractés de tenseurs de plus petite taille. À l'origine développés en physique théorique pour l'analyse des états quantiques fortement corrélés dans les systèmes à plusieurs corps^{175 176}, ces réseaux sont désormais utilisés dans l'apprentissage machine, la simulation numérique et la modélisation de phénomènes physiques complexes, notamment dans le cadre des EDP.

8.1.1 Définition d'un tenseur

Un tenseur est un objet mathématique qui généralise les scalaires (0-tenseurs), vecteurs (1-tenseurs) et matrices (2-tenseurs) à des objets d'indices multiples. On représente graphiquement le tenseur par une forme quelconque dotée d'un nombre d'arêtes, égal à sa dimension, issues de cette forme.

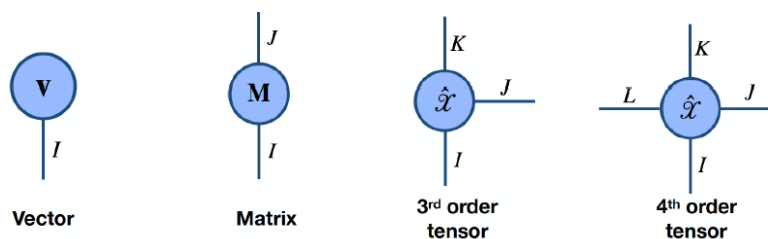


Figure 19 : Représentation de tenseurs¹⁷⁷.

Tout comme les vecteurs et les matrices qui peuvent être multipliés, il est possible d'appliquer aux tenseurs une opération élémentaire : la contraction. Cette opération consiste à multiplier les coefficients de 2 tenseurs et à sommer sur une paire d'indices fixés à l'identique. Lorsque l'on contracte de nombreux tenseurs entre eux, on obtient un réseau de tenseur.

¹⁷⁵ White, S. R. (1992). **Density matrix formulation for quantum renormalization groups.** *Physical Review Letters*, 69(19), 2863–2866.

¹⁷⁶ Vidal, G. (2003). **Efficient classical simulation of slightly entangled quantum computations.** *Physical Review Letters*, 91(14), 147902.

¹⁷⁷ <https://developer.download.nvidia.com/video/gputechconf/gtc/2019/presentation/s9733-role-of-tensors-in-machine-learning.pdf>

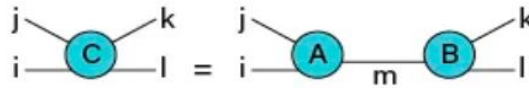


Figure 20 : Exemple de la contraction d'un tenseur C d'ordre 4 en un réseau de 2 tenseurs A et B d'ordre 3¹⁷⁸.

Les réseaux de tenseurs sont donc une représentation des vecteurs d'espaces de Hilbert de très grandes dimensions, applicables dans de nombreux problèmes de calcul intensifs, en intelligence artificielle et en calcul quantique. Il faut souligner que les algorithmes quantiques peuvent être représentés par un réseau de tenseurs.

En contractant un tenseur en un réseau de tenseurs, on réduit la dimension du problème. Cependant, cela ne se fait pas sans perte et cette opération se justifie lorsqu'il existe une certaine « localité » ou corrélations limitées dans le tenseur d'origine. La compression par réseau de tenseurs repose sur l'idée que la plupart des coefficients ne sont pas tous nécessaires pour capturer la structure physique ou statistique du problème, grâce à des propriétés d'entropie limitée. Ainsi, les états quantiques avec des corrélations conditionnelles à courte portée peuvent être représentés et contractés de façon efficace¹⁷⁹.

Il est donc intéressant d'explorer les méthodes et les algorithmes permettant la contraction des réseaux de tenseurs tout en conservant son expressivité.

8.1.2 Utilisation de réseaux de tenseurs pour la résolution d'EDP en grande dimension

La résolution numérique des EDP souffre, en grande dimension, de la croissance exponentielle des ressources nécessaires, un phénomène connu sous le nom de **malédiction de la dimensionnalité**. Par exemple, les méthodes classiques comme celle des différences finies procèdent à une discrétisation de l'espace des variables, ce qui transforme l'EDP continue en une relation discrète entre les valeurs de la solution sur une grille. Si chaque dimension est discrétisée en n points, l'espace résultant comporte n^d points pour une dimension d , rendant rapidement les calculs intraitables.

Les **réseaux de tenseurs** (tensor networks) apportent une solution prometteuse à cette explosion combinatoire. En exploitant la structure de bas rang des tenseurs associés aux solutions d'EDP (ou à leurs opérateurs), ces méthodes permettent de représenter et manipuler des objets de très grande dimension de façon compressée. Des formats tels que **Tensor Train (TT)** ou **Hierarchical Tucker (HT)** permettent de réduire drastiquement les besoins en mémoire et en calcul, tout en conservant une précision contrôlée. Ils s'avèrent particulièrement efficaces pour des classes d'EDP dont les solutions admettent une structure de corrélation faible ou localisée.

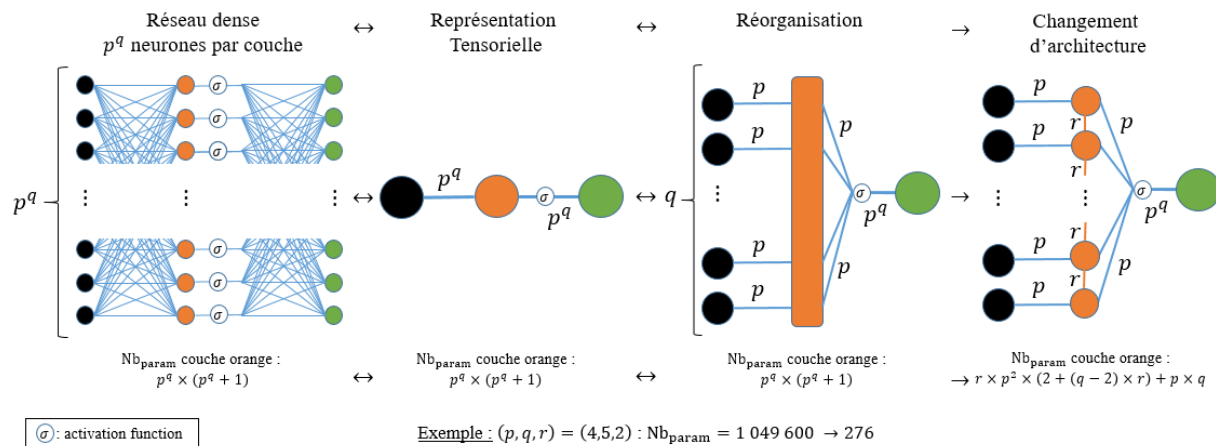
La méthode spectrale recherche la solution de l'EDP dans une famille de fonctions définies comme combinaisons linéaires de fonctions de base dont les dérivées sont analytiques. Là encore, les poids de la combinaison s'écrivent comme un tenseur dont le nombre d'éléments est n^d où n est la taille de la base fonctionnelle et d la dimension de l'espace.

¹⁷⁸<https://www.pourlascience.fr/sd/physique-theorique/reseaux-de-tenseurs-les-ordinateurs-classiques-contre-attaquent-26738.php#:~:text=Les%20r%C3%A9seaux%20de%20tenseurs%20sont%20un%20concurrent%20s%C3%A9rieux%20des%20ordinateurs,qui%20d%C3%A9crit%20le%20syst%C3%A8me%20C%C3%A9tudi%C3%A9>

¹⁷⁹ <https://arxiv.org/pdf/2410.23152>

Là encore, les réseaux de tenseurs peuvent être exploités. Différents algorithmes de construction de ces contractions du tenseur initial sont proposés dans la littérature.

On peut également mentionner l'émergence des méthodes de résolution d'EDP par apprentissage profond (réseau de neurones). Les réseaux de tenseur peuvent accélérer ses méthodes en remplaçant la structure tensorielle des réseaux de neurones par une structure de réseaux de tenseurs tout en gardant une expressivité performante (figure ci-dessous).



8.1.3 Représentation et réduction de la complexité

Le principal intérêt des réseaux de tenseurs réside dans leur capacité à **réduire drastiquement la complexité** des représentations de fonctions multivariées ou de solutions d'EDP dans des espaces à très haute dimension. Par exemple, une solution numérique approchée $u(x_1, x_2, \dots, x_d)$ peut être représentée comme un tenseur $T_{i_1, i_2, \dots, i_d}$ dont les indices correspondent à des discrétisations de chaque variable. Dans les approches classiques, le nombre de coefficients à stocker croît de manière exponentielle avec la dimension d , ce qui conduit à ce qu'on appelle le **fléau de la dimension** (curse of dimensionality).

Les réseaux de tenseurs contournent cette limitation via des décompositions structurées. Il faut pour cela choisir une architecture du réseau adaptée au problème à traiter, ce qui peut parfois être une tâche complexe. La figure suivante montre quelques exemples d'architectures classiques cités dans la littérature¹⁸⁰.

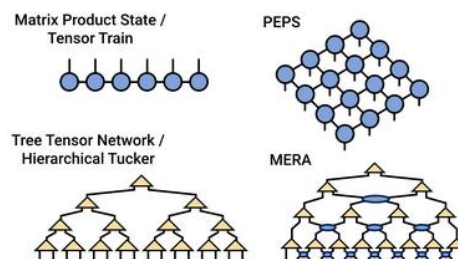


Figure 22 : Architectures de réseaux de tenseurs.

¹⁸⁰ <https://tensornetwork.org/>

Ces formats permettent une **compression efficace** des solutions de certaines EDP tout en préservant la précision et facilitent des opérations comme l'évaluation de la fonction, le produit scalaire ou l'application d'opérateurs différentiels¹⁸¹.

La compression de réseau de tenseur est un sujet de recherche toujours actif avec des avancées récentes. On peut ainsi citer l'algorithme Tensor Cross Interpolation (TCI) qui a fait l'objet en décembre 2024 d'une publication très détaillée avec des exemples de codes et d'applications¹⁸².

8.1.4 Résolution directe et approximation variationnelle

Les réseaux de tenseurs ne servent pas uniquement à stocker les solutions mais peuvent également être utilisés pour **résoudre les EDP** de manière directe. Deux stratégies sont généralement adoptées :

1. **Méthodes variationnelles basées sur les réseaux de tenseurs :**

On pose le problème de minimisation de l'énergie associée à l'EDP (ex. fonctionnelle de Dirichlet pour une équation de Poisson), sous la contrainte que la solution u appartient à une classe de fonctions représentées par un réseau de tenseurs. Cela conduit à des algorithmes variationnels de type DMRG (Density Matrix Renormalization Group) appliqués à des systèmes classiques.

2. **Collocation ou Galerkin dans l'espace des réseaux de tenseurs :**

L'équation est projetée sur une base représentée efficacement en réseaux de tenseurs, ce qui permet de manipuler l'opérateur différentiel sous forme comprimée¹⁸³.

8.1.5 Applications industrielles et cas concrets

Les réseaux de tenseurs ont montré leur efficacité dans des problèmes d'ingénierie, notamment :

- **Modélisation stochastique de matériaux composites**¹⁸⁴: résolution d'EDP stochastiques en mécanique avec variables aléatoires où la décomposition T permet une gestion efficace de la dépendance à des dizaines de variables aléatoires.
- **Simulation de réacteurs chimiques à haute dimension**¹⁸⁵: pour résoudre des équations de transport avec couplage cinétique où le nombre de variables d'état est très élevé.
- **Finance quantitative** : les modèles multi-actifs, en dimension > 10 , peuvent être formulés via des EDP paraboliques pour le pricing d'options. Les réseaux de tenseurs permettent alors une approximation efficace des solutions¹⁸⁶.

¹⁸¹ Grasedyck, L. (2013). **A literature survey of low-rank tensor approximation techniques**. *GAMM-Mitteilungen*, 36(1), 53–78.

¹⁸² <https://arxiv.org/pdf/2407.02454>

¹⁸³ Khoromskij, B. N. (2012). **Tensor-structured numerical methods in scientific computing: Survey on recent advances**. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 110(1), 1–19.

¹⁸⁴ Nouy, A. (2010). **Proper generalized decompositions and separated representations for the numerical solution of high dimensional stochastic problems**. *Archives of Computational Methods in Engineering*.

¹⁸⁵ Dolgov, S. (2014). **Computation of extreme eigenvalues in higher dimensions using block tensor train format**. *Computer Physics Communications*, 185(4), 1207–1216.

¹⁸⁶ Bachmayr, M. (2016). **Tensor approximation of high-dimensional parametric PDEs**. *Foundations of Computational Mathematics*, 16(6), 1501–1530.

8.1.6 Limites et perspectives

Malgré leur puissance, les réseaux de tenseurs présentent plusieurs limitations :

- Ils requièrent des **structures de basse corrélation** dans les données ou la solution, ce qui n'est pas toujours le cas.
- Le **choix du format** (TT, HT, etc.) et de la topologie du réseau influence fortement la performance.
- La **construction adaptative** d'un réseau de tenseurs optimal pour une EDP donnée reste un domaine de recherche actif.

Néanmoins, leur **compatibilité avec les architectures HPC** et leur synergie possible avec des approches quantiques (par exemple, hybridation avec des algorithmes variationnels quantiques) en font une piste incontournable pour les décennies à venir.

9. APPROCHES HYBRIDES – COUPLAGE DE RESEAUX DE TENSEURS, QUANTIQUE & IA

Des architectures combinant réseaux de tenseurs, IA (PINNs, DeepONets) et informatique quantique sont en cours d'exploration pour^{187 188 189} :

- Résoudre des EDP non linéaires dans des régimes instables (fluides turbulents, plasmas) ;
- Approcher des champs de solution avec une faible complexité effective ;
- Obtenir des estimates paramétriques ou des fonctions de réponse avec incertitudes.

9.1 ALGORITHMES INSPIRES DU QUANTIQUE POUR LA RESOLUTION DES EDP

Les algorithmes inspirés du quantique (quantum-inspired algorithms) tirent parti de concepts et structures issus de la mécanique quantique sans pour autant nécessiter de matériel quantique. Ces méthodes, souvent implémentées sur des architectures classiques, exploitent des paradigmes tels que la **superposition**, l'**entanglement structurel** et les **représentations tensorielles**, afin d'atteindre une efficacité accrue sur des problèmes à forte complexité, comme la résolution d'EDP de grande dimension.

L'intérêt de ces approches se renforce dans un contexte où les ressources classiques plafonnent face à l'explosion combinatoire des degrés de liberté. De plus, ces méthodes offrent un pont pragmatique vers l'ère quantique, en fournissant des algorithmes exploitables dès aujourd'hui.

Algorithmes basés sur les réseaux de tenseurs inspirés du quantique :

Les réseaux de tenseurs, très utilisés en simulation quantique (notamment dans les méthodes **DMRG – Density Matrix Renormalization Group** et **TEBD – Time-Evolving Block Decimation**), sont aujourd'hui adaptés à des problèmes classiques de très haute dimension. Ils offrent une représentation comprimée des objets mathématiques issus des EDP (solutions, opérateurs, matrices de rigidité, etc.), permettant de réduire la complexité exponentielle typique.

- **Modèles utilisés**¹⁹⁰ :
 - **MPS / TT (Matrix Product States / Tensor Train)** : Il s'agit en réalité de la même classe de représentations, introduite dans des communautés différentes (physique et calcul scientifique). Elles sont particulièrement adaptées aux systèmes 1D et aux fonctions de nombreuses variables.
 - **PEPS (Projected Entangled Pair States)** : Souvent cité comme une famille à part, PEPS peut en réalité être vu comme une instance particulière de TTN, optimisée pour les réseaux réguliers en 2D ou 3D. Cette structure est pertinente pour représenter des états fortement intriqués ou des solutions de EDP sur des grilles multidimensionnelles.
 - **TTN (Tree Tensor Networks)** : Classe plus générale qui organise les tenseurs dans une structure arborescente hiérarchique, adaptée aux problèmes multi-échelles et aux interactions non locales.

¹⁸⁷ Schuld, M. & Petruccione, F. (2018). *Supervised Learning with Quantum Computers*. Springer.

¹⁸⁸ Han, J., Jentzen, A., & E, W. (2018). *Solving high-dimensional partial differential equations using deep learning*. PNAS, 115(34), 8505-8510.

¹⁸⁹ Oseledets, I. (2011). *Tensor-train decomposition*. SIAM Journal on Scientific Computing, 33(5), 2295-2317.

¹⁹⁰ Grasedyck, L. (2013). *A literature survey of low-rank tensor approximation techniques*. GAMM-Mitteilungen.

- **Représentation des systèmes 2D : deux approches principales**

- **PEPS / TTN hiérarchiques** : permettent de traiter directement les systèmes 2D ou 3D tout en respectant la structure géométrique du problème.
- **Mapping 2D → 1D** : une autre approche largement utilisée consiste à transformer une grille 2D en une chaîne 1D (par ex. en reliant les sites dans un ordre serpentant). On peut alors appliquer directement les méthodes MPS/TT existantes.

Avantage : réutilisation immédiate des algorithmes MPS très matures.

Inconvénient : introduction d'interactions à longue portée dans la chaîne équivalente, ce qui accroît fortement les rangs nécessaires et donc la complexité.

Malgré ces limitations, cette stratégie reste courante en physique numérique, en particulier pour explorer des systèmes de spins sur réseaux bidimensionnels.

- **Représentation des solutions** : Une fonction $u(x_1, \dots, x_d)$ est approximée par un tenseur $T \in R^{n_1 \times \dots \times n_d}$, compressé sous forme d'un réseau de tenseurs avec des contraintes de rangs. Cela permet de réduire une complexité $O(n^d)$ à $O(dnr^2)$ avec r le rang de coupure et donc d'éviter la « malédiction de la dimensionnalité » et de rendre manipulables des objets a priori inaccessibles pour d grand.

Optimisation variationnelle inspirée des principes quantiques :

L'optimisation variationnelle est omniprésente dans la mécanique quantique via le **principe variationnel de Rayleigh-Ritz**. Ce paradigme a été transposé dans des contextes classiques pour approximer les solutions d'EDP via des familles de fonctions paramétriques, souvent sous forme de réseaux de neurones ou de tenseurs.

- **Exemple** : approximation de la solution u^* d'une EDP elliptique :
- $$\int u^* = \arg \min_{u \in \mathcal{V}} \mathcal{E}[u] = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla u(x)|^2 - f(x)u(x) \right) dx$$
- où $\mathcal{V}$ est un espace de fonctions test représentées sous forme compressée ou par des réseaux neuronaux.
- **Méthodes utilisées** :
 - Tensor-train minimization.
 - Approches hybrides réseau de tenseurs + PINNs (Physics-Informed Neural Networks).
 - Minimisation variationnelle avec réécriture fonctionnelle du résidu de l'EDP.

Algorithmes de Monte Carlo inspirés des chemins quantiques :

Les algorithmes de type **quantum path integral Monte Carlo** inspirent de nouvelles techniques pour résoudre des EDP stochastiques (SPDE) en haute dimension. Ces approches explorent des chemins aléatoires dans des espaces de configurations, utilisant des formulations fonctionnelles proches de la mécanique quantique^{191 192}.

- **Applications typiques** :
 - Équation de Schrödinger en mécanique quantique.
 - EDP elliptiques stochastiques avec conditions incertaines.

¹⁹¹ Ceperley, D. (1995). **Path integrals in the theory of condensed helium**. *Reviews of Modern Physics*.

¹⁹² Hairer, M. (2014). **A theory of regularity structures**. *Inventiones Mathematicae*.

- Calcul de quantités intégrales associées à des solutions (ex. espérance de fonctionnelles).

Algorithmes combinatoires inspirés du quantum annealing :

Certains problèmes de résolution d'EDP sont transformés en problèmes d'optimisation combinatoire (ex. discrétisation, maillage adaptatif, pré conditionnement) qu'on peut résoudre via des méthodes inspirées du **recuit quantique**^{193 194}.

- **Principe :** Transformer un problème discret en une fonction d'énergie $E(x)$ sur un espace de configurations et explorer les minima via des méthodes stochastiques avec "tunneling".
- **Applications :**
 - Génération de maillages adaptatifs.
 - Réduction de modèle.
 - Recherche d'approximation de solution faible dans des espaces discrets.

9.2 INTELLIGENCE ARTIFICIELLE POUR LES EDP

Malgré son rôle annoncé, l'IA est encore peu décrite dans ce cadre. Cependant, plusieurs travaux récents montrent comment les réseaux de neurones peuvent compléter ou fusionner avec les TN :

1. **PINNs et DeepONets :** classes de réseaux entraînés directement sur des équations différentielles. Exemple :
 - *Fokker–Planck equation via Neural Networks*¹⁹⁵
 - La fonction coût est composée de deux termes :

$\mathcal{L}_{\mathcal{PDE}}$ impose la satisfaction locale de l'équation différentielle.

$\mathcal{L}_{BC}$ encode les conditions aux limites.
2. **Réseaux de neurones représentés par des réseaux de tenseurs :**
 - Un réseau dense peut être factorisé en **Tensor Train Neural Network (TTNN)**, réduisant drastiquement le nombre de paramètres¹⁹⁶
 - Cela ouvre la voie à des architectures hybrides où l'IA est "compressée" par TN, ce qui améliore la scalabilité et l'interprétabilité.
3. **Lien avec CompactifAI :** l'idée est précisément de tirer parti de représentations tensorielles compactes pour **compresser les réseaux de neurones** tout en préservant leur expressivité. Cela unifie trois paradigmes :
 - l'IA pour l'approximation universelle,
 - les TN pour la compression structurelle,

¹⁹³ Kadowaki, T. (1998). **Quantum annealing in the transverse Ising model**. *Physical Review E*.

¹⁹⁴ Denchev, V. (2016). **What is the computational value of finite-range tunneling?** *Physical Review X*.

¹⁹⁵ <https://arxiv.org/abs/1910.10503>

¹⁹⁶ Novikov, A. (2015). **Tensorizing Neural Networks**. *ArXiv*

- l’informatique quantique comme cadre d’exécution future.

Perspectives et limites :

Ces approches permettent de :

- Réduire la **dimension effective** des espaces de recherche.
- Capturer des **structures globales** ou **symétries** que les méthodes classiques peinent à modéliser.
- Exploiter la **physique sous-jacente** pour guider la construction des solutions.

Mais elles posent encore des défis :

- Difficulté à garantir la **convergence** théorique.
- Dépendance au **choix des paramétrisations**.
- Complexité des algorithmes de compression et d’optimisation.

9.3 SYNERGIE ENTRE RESEAUX DE TENSEURS ET CALCUL QUANTIQUE

Les réseaux de tenseurs et le calcul quantique sont deux paradigmes puissants pour traiter la complexité inhérente aux systèmes physiques et mathématiques de grande dimension. Leur combinaison exploite la structure sous-jacente des données et des états quantiques, permettant de contourner la malédiction de la dimension dans la résolution numérique d’équations différentielles partielles (EDP) complexes.

9.3.1 Exemples d’applications réussies

- **Simulation de dynamiques non linéaires** : Les réseaux de tenseurs, comme les Matrix Product States (MPS) ou les Projected Entangled Pair States (PEPS), fournissent une représentation compacte des états quantiques et des fonctions d’onde multidimensionnelles. Associés à des algorithmes quantiques de simulation Hamiltonienne, ils ont permis d’approximer efficacement des dynamiques non linéaires difficiles à simuler par des méthodes classiques. Par exemple, Ran en 2020¹⁹⁷ ont démontré la simulation précise de dynamiques spin-chain non linéaires en combinant ces outils.
- **Approximation efficace des solutions de grandes EDP** : Les réseaux de tenseurs exploitent la faible dimension effective (rang) des opérateurs issus de la discrétisation d’EDP pour offrir des approximations compressées des solutions. Leur intégration dans des architectures hybrides avec des algorithmes quantiques, notamment ceux basés sur la transformation de phase quantique (QPE) ou les méthodes variationnelles (VQE), a permis d’obtenir des gains exponentiels ou quasi-exponentiels en complexité sur certains problèmes de diffusion multi-échelle¹⁹⁸.
- **Finance computationnelle** : De manière générale, les méthodes de « tensorisation » des réseaux de neurones s’avèrent très efficaces. Dans un réseau dense à n neurones par couche, chaque couche contient une matrice de paramètres de dimension $n \times n$ plus un vecteur de biais de dimension n . Si n est grand, la taille mémoire du réseau et le temps de son

¹⁹⁷ Ran et al. (2020). **Rational boundary charge in one-dimensional systems with interaction and disorder.** *Phys. Rev. Research* 2, 033345

¹⁹⁸ Garcia-Saez et al. (2018). **Online strategies for exactly identifying a quantum change point.** *Phys. Rev. A* 98, 052305

apprentissage peuvent devenir prohibitifs. « Tensoriser » une couche de réseau de neurone consiste à remplacer la matrice de paramètre par un réseau de tenseur de sous forme MPO dont les dimensions libres restent de taille $n \times n$ mais dont le nombre de paramètres est de l'ordre $n^{2/p} \times k^2 \ll n \times n$ où p est le nombre de tenseur et k est la dimension interne de l'approximation.

La taille mémoire et le temps d'apprentissage d'une telle architecture sont considérablement réduits. Dans les cas que nous avons expérimentés, l'expressivité du réseau n'était pas altérée par ce changement d'architecture : la fonction de coût à minimiser était du même ordre de grandeur pour les deux types d'architectures.

9.3.2 Défis d'une approche combinée réseau de tenseurs & quantique

Malgré ces succès prometteurs, plusieurs défis techniques restent à surmonter pour exploiter pleinement cette synergie :

- **Complexité de la construction et manipulation des réseaux** : La conception de réseaux de tenseurs adaptés aux particularités des EDP, notamment pour des discrétisations spatiales irrégulières ou des domaines complexes, demande des méthodes sophistiquées de compression et d'adaptation. Cette complexité doit être conciliée avec les capacités actuelles limitées des architectures quantiques.
- **Intégration avec des circuits quantiques réalistes** : La traduction des représentations en réseaux de tenseurs en circuits quantiques efficaces requiert la définition d'oracles et d'opérateurs unitaires complexes. Leur implémentation doit minimiser le nombre de qubits et la profondeur de circuit, ce qui demeure un défi majeur compte tenu des ressources limitées des machines NISQ.
- **Gestion du bruit et de la décohérence** : Les erreurs inhérentes aux qubits actuels impactent fortement la précision des calculs. Les algorithmes hybrides doivent donc intégrer des stratégies robustes de correction d'erreurs et d'optimisation pour maintenir la validité des approximations issues des réseaux de tenseurs.
- **Scalabilité et validation** : Il est nécessaire de développer des benchmarks clairs et des protocoles de validation pour mesurer l'efficacité réelle de ces approches hybrides, en particulier dans des contextes industriels où la précision et la robustesse sont critiques.

En dépit de ces défis, le domaine est en pleine évolution, porté par des avancées rapides dans la théorie des réseaux de tenseurs, la conception d'algorithmes quantiques et le développement matériel. Cette synergie est appelée à jouer un rôle clé dans la prochaine génération d'outils pour la résolution numérique des EDP complexes.

10. LIMITATIONS ET DEFIS COMMUNS DES NOUVELLES METHODES

Les approches émergentes pour la résolution des Équations aux Dérivées Partielles (EDP), telles que le calcul quantique et les réseaux de tenseurs, suscitent un intérêt croissant en raison de leur potentiel de rupture. Cependant, malgré leurs promesses théoriques, elles partagent des limites structurelles, computationnelles et théoriques qu'il est impératif de comprendre pour envisager une adoption industrielle réaliste. Ce chapitre vise à dresser un panorama rigoureux de ces défis.

Problèmes de scalabilité et de généralisation :

Les méthodes quantiques et tensorielles souffrent de limitations dans leur capacité à généraliser sur des familles larges d'EDP. En calcul quantique, la scalabilité des circuits quantiques est contrainte par le nombre de qubits disponibles et la fidélité des opérations. Par exemple, dans les algorithmes variationnels (VQE, QAOA), l'optimisation des paramètres peut s'effondrer en régime de bruit, ce qui limite la résolution d'EDP complexes.

Les réseaux de tenseurs (notamment les MPS et PEPS) excellent dans les basses dimensions où les structures à faible entropie d'intrication, mais leur expressivité se dégrade rapidement lorsque les corrélations longues distances ou les hétérogénéités spatiales dominent¹⁹⁹.

Coûts en ressources computationnelles :

Même si les méthodes sont réputées efficaces dans la théorie de la complexité, leur mise en œuvre concrète est souvent coûteuse. L'algorithme de HHL, qui promet une accélération exponentielle pour la résolution d'un système linéaire – cœur de nombreuses méthodes d'EDP – exige une préparation d'état quantique et une mesure post-traitée qui rendent son application très restreinte aux cas bien conditionnés et à matrices creuses. Pour les réseaux de tenseurs, le coût de contraction croît de façon exponentielle avec la coordination locale et la dimension du réseau.

Encadré mathématique : Le coût de contraction d'un réseau de tenseurs dépend du graphe d'interconnexion. Pour un PEPS en 2D avec coordination z , la contraction exacte est de complexité $O(D^{2z})$ où D est la dimension de lien. Cela devient prohibitif dès que $D > 10$.

Difficultés liées à l'interprétabilité et la validation :

Contrairement aux méthodes classiques (éléments finis, volumes finis), les méthodes quantiques ou tensorielles ne disposent pas toujours d'outils robustes d'analyse d'erreur ou d'estimation a posteriori. La reproductibilité et la certification des résultats sont donc plus difficiles à garantir. Cela est problématique dans les contextes critiques (nucléaire, médical, aéronautique).

Limites théoriques et approximations heuristiques :

De nombreuses implémentations, en particulier sur matériel NISQ, s'appuient sur des heuristiques (optimisation variationnelle, régularisation empirique, initialisation aléatoire, etc.) dont la convergence est mal comprise. Par exemple, la barren plateau phenomenon²⁰⁰ explique pourquoi les gradients des fonctions coût peuvent tendre vers zéro de manière exponentielle, bloquant l'apprentissage.

¹⁹⁹ Orús, R. (2014). **A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states.** *Annals of Physics*, 349, 117–158.

²⁰⁰ McClean, J. R. (2018). **The Barren Plateau in Quantum Neural Networks.** *Quantum Science and Technology*, 4(2), 025003.

Limitation	Méthodes classiques	Méthodes quantiques (NISQ, FTQC)	Réseaux de tenseurs (MPS, PEPS)
Scalabilité en dimension	Mauvaise	Limitée à NISQ, meilleure à long terme	Forte dépendance à la topologie du réseau
Coût mémoire	Modéré	Forte pour FTQC, limité pour NISQ	Croît exponentiellement avec D
Bruit et erreurs	Faible (double précision)	Fort sur NISQ, meilleure en FTQC	Faible
Certifiabilité et rigueur mathématique	Élevée	Faible sur NISQ	En cours de formalisation
Applicabilité industrielle	Très large	En phase de test	Pour cas spécifiques
Interprétabilité	Élevée	Faible sur circuits profonds	Dépend du format de réseau

Tableau 12 : Comparaison des limitations des méthodes classiques, quantiques et tensorielles.

10.1 SCALABILITE ET GENERALISATION

La résolution d'EDP dans des contextes industriels exige une montée en échelle (scalabilité) à haute dimension et forte précision. Or, les méthodes **quantique** et **réseaux de tenseurs** atteignent leurs limites.

Méthodes quantiques (NISQ et FTQC) :

- Sur les architectures NISQ, les qubits sont bruyants et instables. Leur profondeur de circuit utilisable est limitée par le **T1/T2 time** (temps de décohérence).
- Les algorithmes variationnels (comme le **Variational Quantum Linear Solver** ou **VQLS**) sont censés approximer la solution d'un système linéaire $Ax = b$ (problème central dans la discrétisation des EDP). Cependant, la profondeur des circuits quantiques est souvent trop grande pour le bruit ambiant.
- Les performances de ces algorithmes décroissent très rapidement dès que la **condition** de la matrice A augmente ou que la **dimension** du problème croît²⁰¹.
- **Au-delà du NISQ** : les architectures de calcul quantique tolérantes aux fautes (FTQC) pourraient lever ces limitations mais elles ne sont pas encore disponibles à grande échelle.

Réseaux de tenseurs (MPS, TT, PEPS) :

- Ces méthodes fonctionnent très bien sur des problèmes avec **structure locale**, **faible entropie d'intrication** ou en **1D**.
- En 2D ou 3D, le coût de contraction devient exponentiel avec la dimension du lien D . L'approximation des EDP couplées (comme thermomécanique ou fluide-structure) devient alors très difficile.
- Le **"curse of expressivity"** : vouloir représenter des fonctions complexes nécessite une dimension de lien énorme, ce qui engendre une explosion du coût mémoire et du temps de calcul.

Encadré mathématique : pour un **MPS (Matrix Product State)** représentant une fonction multidimensionnelle $u(x_1, \dots, x_n)$:

²⁰¹ Tang, E. (2021). **Quantum-inspired classical algorithms for principal component analysis and supervised clustering.** *Journal of the ACM (JACM)*, 68(6), Article 41.

$$u(x_1, \dots, x_n) \approx \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{n-1}} A_{x_1, \alpha_1}^{(1)} A_{\alpha_1, x_2, \alpha_2}^{(2)} \dots A_{\alpha_{n-1}, x_n}^{(n)}$$

les indices x_i correspondent aux variables physiques (valeurs discrétisées des coordonnées spatiales, états spin, etc.) ; les indices α_k sont appelés **indices de liaison (bond indices)**, et prennent des valeurs dans un espace de dimension au plus D (c'est la **dimension de lien**) ; la sommation sur les α_k encode les **corrélations** entre les différentes parties du système.

Ainsi, la **bond dimension D** contrôle le compromis entre :

1. **Capacité d'approximation** : plus D est grand, plus le réseau peut représenter des corrélations longues portées ou une entropie d'intrication élevée ;
2. **Complexité numérique** : le coût mémoire est en $\mathcal{O}(nD^2d)$, où n est le nombre de variables et d la taille du domaine discret de chaque variable.

En termes heuristiques, la **dimension de lien** agit comme un paramètre de compression :

- faible $D \rightarrow$ représentation compacte, mais peu expressive ;
- grand $D \rightarrow$ expressivité élevée, mais coût exponentiel en pratique.

Problèmes de bruit, précision et certification :

Quantique :

- L'environnement NISQ impose un **bruit de lecture**, des **portes imparfaites** et une **décohérence** continue.
- Il est difficile de vérifier si le résultat obtenu est proche de la solution exacte.
- Les algorithmes quantiques n'ont pas encore de **méthodes robustes d'estimation d'erreur a posteriori**, contrairement aux méthodes de Galerkin ou de Ritz en éléments finis.

Réseaux de tenseurs :

- Le **choix de la topologie du réseau** influe fortement sur la qualité de l'approximation. Or, ce choix est souvent heuristique.
- Il n'existe pas de **critère mathématique universel** pour garantir une bonne approximation d'une solution d'EDP donnée.

Difficultés en haute dimension :

Le nombre de degrés de liberté augmente **exponentiellement** avec la dimension d , un phénomène connu sous le nom de "**malédiction de la dimension**" (curse of dimensionality). Exemple : une discrétisation d'un domaine 10D avec 10 points par dimension mène à 10^{10} inconnues.

- Les méthodes classiques deviennent inapplicables en mémoire (RAM).
- Les méthodes de réseaux de tenseurs peuvent **compresser** certaines fonctions mais pas toutes : si la fonction solution a une **structure aléatoire** ou **peu compressible**, les tenseurs deviennent inefficaces.
- Les méthodes quantiques **théoriques** (comme HHL) promettent un **logarithme** du nombre de dimensions, mais **nécessitent des oracles** d'accès à la matrice ou à l'état préparé. La complexité associée à ces oracles doit être intégrée dans celle des algorithmes quantiques. La

conception de ces oracles (ou requêtes) pour la mise en œuvre des EDP constitue un domaine de recherche très actif, mais elle présente d'importants défis, notamment pour les discrétisations spatiales irrégulières.

Coût énergétique et matériel :

Les simulations basées sur les réseaux de tenseurs à grande échelle requièrent des **infrastructures de calcul** spécialisées, souvent appuyées sur des bibliothèques hautement optimisées (par exemple ITensor, TensorNetwork ou ExaTENSOR). Ces approches sont particulièrement **exigeantes en mémoire vive et en bande passante mémoire**, ce qui limite leur déploiement à des centres de calcul disposant de ressources matérielles importantes.

Les architectures quantiques, quant à elles, impliquent des contraintes matérielles significatives, mais variables selon la technologie de qubits considérée. Certaines plateformes, notamment les **qubits supraconducteurs ou ioniques**, nécessitent des environnements **cryogéniques complexes**, une instrumentation de contrôle sophistiquée et une calibration fréquente. D'autres modalités, telles que les approches **photoniques, les atomes neutres ou les centres NV dans le diamant**, ne requièrent pas de cryogénie profonde, mais présentent néanmoins des défis technologiques spécifiques en matière de stabilité, de contrôle et de mise à l'échelle.

Dans l'ensemble, les coûts d'acquisition, d'exploitation, de maintenance et de montée en charge des infrastructures quantiques restent élevés à l'état actuel de la technologie. Ces contraintes économiques et opérationnelles constituent un frein majeur à une diffusion large, en particulier pour des usages industriels continus ou à grande échelle.

Dimension du problème	Méthodes classiques	Réseaux de tenseurs	Méthodes quantiques
1D	Très efficaces	Très efficaces (MPS, TT)	Complexité inutile
2D	Bonne discrétisation	Possible avec PEPS	Possible mais bruit limité
3D+	Très coûteux	Contraction très difficile	Trop bruyant (sauf FTQC théorique)
10D+(EDP stochastiques)	Inapplicable	TT ou HT-Tensor pour cas spécifiques	Théorique uniquement

Tableau 13 : Limites théoriques et pratiques – Résumé par dimension

11. PERSPECTIVES ET FEUILLE DE ROUTE

Le développement des technologies quantiques et des approches hybrides pour la résolution des EDP ouvre des perspectives inédites, conditionnées par des avancées technologiques majeures (augmentation du nombre de qubits logiques, réduction des taux d'erreurs, mise en œuvre de la correction d'erreurs à grande échelle, déploiement de mémoires quantiques, interconnexion de cœurs quantiques, etc.). Toutefois, l'incertitude sur ces trajectoires exige une mobilisation concertée des acteurs industriels, académiques et publics, afin d'anticiper les usages, d'accélérer la levée des verrous techniques et de structurer un écosystème autour des EDP.

11.1 APPROCHES MIXTES : COMBINAISON DE L'IA, DU QUANTIQUE ET DES RESEAUX DE TENSEURS

Dans ce chapitre, nous allons approfondir la combinaison des technologies quantiques, des réseaux de tenseurs et de l'intelligence artificielle, avec un focus particulier sur leur intégration pour résoudre des **équations aux dérivées partielles (EDP)** complexes. Ces approches mixtes permettent de tirer parti des points forts de chaque technologie, notamment la capacité de **calcul parallèle** du quantique, la **modélisation de systèmes complexes** par IA et l'**optimisation** par réseaux de tenseurs. Nous aborderons également les défis associés et les étapes à suivre pour intégrer ces solutions dans des **plateformes de calcul hybrides**.

11.2 INTEGRATION DES SOLVEURS QUANTIQUES AVEC LES RESEAUX NEURONAUX ET TENSORIELS

Réseaux de Tenseurs dans les EDP :

Les **réseaux de tenseurs** sont un cadre mathématique puissant pour manipuler et calculer des données multidimensionnelles, particulièrement utiles dans les EDP de grande dimension. Un **tenseur** est une généralisation d'un vecteur et d'une matrice, représentant des données dans des espaces de dimension supérieure. Leur utilité dans les EDP provient de leur capacité à **modéliser des relations complexes** et à **extraire des informations pertinentes** de jeux de données multidimensionnels.

Les réseaux de tenseurs, notamment ceux utilisés dans les architectures comme les **réseaux neuronaux à tensorisation**, permettent de **réduire la complexité** des calculs tout en conservant une grande précision. Pour résoudre des EDP complexes, cette approche repose sur la **factorisation de matrices et de tenseurs**, permettant de résoudre les équations de manière plus efficace et d'éviter l'**explosion combinatoire** typique des méthodes classiques.

Modélisation hybride avec IA et Quantique :

L'IA, et en particulier les **réseaux neuronaux**, peut être utilisée pour **apprendre des modèles** approximatifs des solutions des EDP avant qu'elles ne soient affinées à l'aide de techniques quantiques. Les réseaux neuronaux peuvent fournir des **approximations initiales** des solutions, qui sont ensuite améliorées par des **algorithmes quantiques** tels que le **QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm)** et le **VQE (Variational Quantum Eigensolver)**. Ces algorithmes sont conçus pour résoudre des **problèmes d'optimisation combinatoire** et d'**optimisation de paramètres**, respectivement.

Exemple de cas d'utilisation :

- **Optimisation de la chaleur dans les matériaux** : Un réseau de neurones peut être utilisé pour prédire les zones chaudes ou froides d'un matériau, et ensuite, un algorithme quantique comme le **QAOA** peut être utilisé pour optimiser la répartition thermique en fonction des données mesurées.

11.3 COMBINAISON IA ET QUANTIQUE : VERS DES ALGORITHMES HYBRIDES

Les **algorithmes hybrides** sont une combinaison d'algorithmes quantiques et classiques. Ces algorithmes peuvent tirer parti des **capacités parallèles** du quantique tout en utilisant des techniques classiques pour certaines étapes du calcul, comme l'initialisation ou l'optimisation des paramètres. Cette approche hybride est particulièrement utile lorsque les ordinateurs quantiques actuels, encore limités par les effets de décohérence et le bruit, ne peuvent pas effectuer l'ensemble du calcul efficacement.

QAOA : Le QAOA est un algorithme d'**optimisation quantique** qui utilise des circuits quantiques pour approximer des solutions à des problèmes combinatoires complexes. Il peut être appliqué pour résoudre des EDP non linéaires complexes, en particulier dans les systèmes où les solutions doivent être obtenues par **optimisation globale**.

VQE : Le VQE est un algorithme qui résout principalement des problèmes d'algèbre linéaire en utilisant une approche par optimisation variationnelle, notamment dans le contexte de systèmes quantiques complexes. Il est particulièrement adapté aux systèmes avec un grand nombre de degrés de liberté. Le VQE peut être utilisé pour déterminer les **propriétés spectrales** des solutions aux EDP dans des systèmes physiques, en utilisant un algorithme hybride pour optimiser les paramètres d'un circuit quantique, puis appliquer les résultats aux EDP.

Quantum Neural Networks : Les réseaux neuronaux quantiques, qui intègrent des **opérations quantiques** dans les couches du réseau, sont utilisés pour résoudre des problèmes d'optimisation où l'espace de recherche est trop vaste pour être traité par des méthodes classiques. Ils permettent de **capturer les relations non linéaires** dans des systèmes à grande dimension.

11.4 VERS DES PLATEFORMES DE CALCUL HYBRIDES

Une **plateforme hybride** combine à la fois des ressources **classiques** et **quantiques** pour résoudre des problèmes complexes. Les ordinateurs quantiques actuels sont limités par le bruit, la décohérence et le nombre de qubits, mais peuvent encore être utilisés pour **accélérer certaines parties du calcul**. Les ordinateurs classiques, quant à eux, sont puissants pour certaines étapes comme la **discrétisation des EDP** et la **gestion des données**.

Architecture Hybride : Classique et Quantique

L'approche hybride fonctionne sur un modèle où **les parties classiques du calcul** gèrent des tâches telles que la **discrétisation** et la gestion des **grilles spatiales**. Les **algorithmes quantiques** sont utilisés pour optimiser certaines étapes du calcul qui sont coûteuses en ressources, comme les calculs sur de grandes matrices ou la recherche de minima globaux dans des espaces complexes.

Exemple de plateforme hybride :

- **D-Wave Systems** : Ce fournisseur de calcul quantique propose des ordinateurs quantiques à **recuit quantique** qui peuvent être utilisés pour des applications d'optimisation, et peuvent être combinés avec des **ordinateurs classiques** pour résoudre des **EDP complexes** dans des domaines comme la **mécanique des fluides**.

Défis des plateformes hybrides :

Les **plateformes hybrides** sont encore à un stade de développement, mais elles présentent plusieurs avantages :

- **Répartition des tâches** : Séparer les tâches classiques des tâches quantiques permet de maximiser l'efficacité des deux types de machines.

- **Résilience face au bruit** : En cas de bruit quantique ou d'erreurs de décohérence, les parties classiques peuvent intervenir pour ajuster les résultats quantiques ou recommencer les calculs.
- **Amélioration continue** : À mesure que les ordinateurs quantiques deviennent plus puissants, ces plateformes peuvent évoluer pour exploiter une part plus importante du calcul quantique.

Les plateformes hybrides combinant ressources classiques et modules quantiques sont prometteuses pour répartir les tâches computationnelles. Mais, ces architectures sont encore expérimentales. Leur efficacité repose sur une orchestration précise, une latence faible, et un découplage clair entre les étapes classiques (discrétisation, stockage) et quantiques (optimisation locale, estimation probabiliste).

11.5 FEUILLE DE ROUTE

11.5.1 Impact global des nouvelles approches sur les sciences et l'industrie

Les avancées attendues dans le domaine du calcul quantique et des nouvelles approches de résolution des EDP s'inscrivent dans un cadre technologique ambitieux mais incertain où la levée de plusieurs verrous critiques conditionnera les usages futurs. Ces perspectives reposent sur des jalons technologiques précis qui structurent les scénarios d'évolution à moyen et long terme.

D'un point de vue matériel, la montée en échelle du calcul quantique exige :

- **L'atteinte d'un nombre significatif de qubits logiques** : un seuil de 50 qubits logiques permettrait d'entrevoir un avantage quantique théorique, tandis qu'une véritable bascule industrielle nécessiterait de dépasser la barre des 100 qubits logiques avec un taux d'erreur inférieur à 10^{-12} , seuil critique pour la correction d'erreurs et la stabilité des calculs sur des circuits profonds. La trajectoire vers des machines dotées de plusieurs milliers de qubits logiques (Very Large Scale Quantum, VLSQ) reste conditionnée à des avancées majeures sur plusieurs fronts technologiques.
- **La réduction des taux d'erreurs des qubits physiques et logiques** : atteindre et dépasser le seuil des 10^{-3} pour les qubits physiques est indispensable à la mise en œuvre de la correction d'erreurs, mais des réductions supplémentaires ($< 10^{-5}$) sont requises pour les applications avancées.
- **Le développement et l'intégration de la mémoire quantique (QRAM)** : cette brique est essentielle pour le traitement de problèmes à forte intensité de données (recherche dans des bases non indexées, algorithmes Grover, etc.) et pour l'exécution efficace d'algorithmes tels que HHL ou VQE dans le cadre des EDP.
- **L'interconnexion de cœurs quantiques** : la modularité des architectures et la capacité à faire dialoguer efficacement plusieurs unités de calcul quantique est un levier stratégique pour atteindre des puissances de calcul supérieures.
- **L'optimisation des chaînes de commande** (miniaturisation, fiabilité, réduction des coûts par un facteur 100) et la gestion de la consommation énergétique (progrès des technologies cryogéniques).

Sur le plan algorithmique, les progrès attendus concernent :

- **Le développement d'algorithmes à faible profondeur de circuit**, capables de tolérer un certain niveau de bruit et adaptés aux limitations des architectures NISQ.

- **La découverte de nouveaux algorithmes ou l'optimisation d'algorithmes existants** (par exemple pour l'optimisation combinatoire, la simulation de matériaux, les problèmes inverses, et la résolution d'EDP).
- **La création d'environnements hybrides HPC/quantique**, intégrant la préparation des données classiques, le transfert et l'encodage quantique, la lecture et l'interprétation des résultats, et la correction des erreurs sur toute la chaîne de traitement.

Les trajectoires d'évolution envisagées se répartissent en plusieurs hypothèses prospectives :

- **Scénario conservateur** : les calculateurs quantiques restent cantonnés à des capacités limitées (quelques dizaines de qubits logiques) avec des applications de niche sur des problèmes à faible complexité, comme certaines optimisations locales ou des tâches spécifiques de clustering.
- **Scénario de montée en puissance progressive** : des progrès incrémentaux permettent d'atteindre des centaines de qubits logiques faiblement bruités, ouvrant la voie à des applications industrielles ciblées dans la chimie (modélisation moléculaire), la finance (gestion des risques) et certaines simulations physiques.
- **Scénario de rupture** : la levée des principaux verrous (QRAM, interconnexion des cœurs, correction d'erreurs à large échelle) permet l'avènement d'architectures VLSQ et l'accès à des classes de problèmes aujourd'hui hors de portée : factorisation d'entiers, résolution d'EDP complexes, problèmes inverses en géophysique ou en mécanique des fluides, et optimisation combinatoire sur des jeux de données massifs.
- **Scénario d'échec partiel** : l'absence de percées significatives sur le matériel ou l'algorithmie limite les usages du quantique à des démonstrateurs technologiques et à des solutions analogiques de niche, avec un impact économique marginal et des retombées scientifiques limitées.

Ces projections soulignent un point essentiel : **le calcul quantique ne remplacera pas le calcul classique, mais viendra compléter certaines tâches spécifiques**, en particulier celles où la superposition, l'intrication et le parallélisme massif offrent des avantages théoriques. La convergence entre calcul intensif, intelligence artificielle et technologies quantiques constituera un facteur différenciant majeur pour l'industrialisation des solutions. Toutefois, sans franchissement des jalons identifiés, les ambitions de rupture technologique resteront inaccessibles.

11.5.2 Appel à contributions pour un écosystème collaboratif autour des EDP

Compte tenu des défis identifiés et des incertitudes sur l'évolution technologique, il est impératif de structurer un écosystème collaboratif dédié aux EDP et à leurs méthodes de résolution avancées. Cet écosystème doit intégrer les expertises des acteurs académiques, industriels et technologiques, et se donner pour objectifs :

- **D'identifier les cas d'usage stratégiques des EDP** dans les filières prioritaires (santé, énergie, transport, finance, défense, climat), en caractérisant les besoins en précision, en vitesse de calcul et en consommation énergétique.
- **De développer des méthodes hybrides et adaptatives** combinant le calcul quantique, l'intelligence artificielle et le calcul haute performance, afin de surmonter les limitations actuelles des architectures NISQ et de préparer l'arrivée des architectures FTQC et VLSQ.
- **De coconcevoir des algorithmes et des schémas numériques adaptés** aux contraintes du quantique : profondeur de circuit, tolérance au bruit, complexité d'encodage, préparation et transfert des données, et interprétation des résultats probabilistes.

- **De mutualiser les efforts sur la levée des verrous technologiques critiques** : correction d'erreurs, QRAM, interconnexion des cœurs, miniaturisation des chaînes de commande, réduction des coûts et standardisation des interfaces logicielles et matérielles.
- **De structurer des feuilles de route claires, des projets pilotes et des jalons partagés**, en s'appuyant sur des benchmarks spécifiques aux EDP, des métriques de performance (précision, robustesse, consommation énergétique) et des tests multi-scénarios couvrant un spectre large de cas industriels et scientifiques.
- **D'anticiper l'impact sociétal et éthique** du développement de ces technologies, en intégrant des réflexions sur la souveraineté numérique, la sécurité des données, la formation des talents et la compréhension des enjeux par le grand public.

Nous invitons les chercheurs, les ingénieurs, les entreprises, les décideurs publics et les institutions à contribuer activement à cette démarche collective. C'est en mutualisant les expertises, en partageant les données et les cas d'usage, et en alignant les efforts de recherche, de développement et d'industrialisation que nous pourrions relever les défis des EDP à l'ère du calcul quantique. Ensemble, nous pouvons préparer l'avenir, développer des solutions robustes et efficaces, et garantir que les avancées scientifiques bénéficient aux grandes filières industrielles et à la société dans son ensemble.

Synthèse : Les travaux sur les EDP, intégrant calcul quantique, IA et réseaux de tenseurs, illustrent la convergence progressive des avancées théoriques, des contraintes matérielles et des exigences applicatives. Les résultats obtenus à ce stade confirment le potentiel des approches mixtes pour explorer de nouveaux régimes de complexité mais soulignent également la nécessité de franchir des seuils technologiques critiques (notamment en termes de qubits logiques, de correction d'erreurs et d'intégration des architectures hybrides) avant d'envisager une industrialisation à grande échelle. Cette dynamique requiert des efforts coordonnés pour consolider les bases mathématiques, optimiser les algorithmes et démontrer la robustesse des solutions sur des cas d'usage concrets, tout en veillant à la reproductibilité et à la scalabilité des approches.

Enjeux futurs et cadre d'action : L'anticipation des évolutions technologiques à moyen et long terme implique de structurer des actions stratégiques alignées avec les besoins des grandes filières industrielles et les priorités de recherche en sciences fondamentales. Ces enjeux incluent la mise en œuvre de prototypes robustes, l'exploration de schémas hybrides adaptatifs, la création d'infrastructures de calcul intégrées et l'élaboration de standards partagés pour les méthodes, les benchmarks et les métriques d'évaluation.

12. HORIZON

12.1 DEFIS ET PERSPECTIVES POUR LA RESOLUTION QUANTIQUE DES EDP

La résolution des équations aux dérivées partielles est au cœur de nombreux domaines scientifiques et industriels (mécanique des fluides, transfert thermique, propagation des ondes, finance quantitative, conception de matériaux). Les approches classiques, malgré leur maturité, rencontrent des limites inhérentes : complexité computationnelle croissante avec la dimension, explosion combinatoire liée au raffinement des maillages et contraintes de précision numériques.

Dans ce contexte, l'informatique quantique, les méthodes hybrides (quantique–classique), les réseaux de tenseurs et les approches inspirées du quantique constituent des pistes de recherche prometteuses. Les perspectives concernent autant l'amélioration des **architectures matérielles** que la mise au point d'**algorithmes adaptés** aux contraintes physiques et numériques des EDP.

12.1.1 Défis technologiques des architectures quantiques

Progrès technologiques dans les qubits NISQ :

- **Stabilité et fiabilité accrue** : Les systèmes NISQ comme ceux d'IBM, Quantinuum ou Pasqal visent une augmentation significative du **fidelity rate** (> 99.9 %) sur des systèmes atteignant les **100-500 qubits physiques**.
- **Réduction du bruit** via des techniques comme le **dynamical decoupling**, la **mitigation d'erreurs** (VQE + error extrapolation) ou encore le **post-selection**.
- **Cibles industrielles** : EDP paraboliques (transport de chaleur), via des solveurs variationnels (VQLS) ou quantification du risque financier.

Avancées vers le calcul tolérant aux fautes (FTQC) :

Des progrès sont attendus dans le domaine du calcul quantique tolérant aux fautes, grâce au raffinement des codes de correction d'erreurs comme **les surface codes ou les Floquet codes**, qui permettent d'envisager l'exécution de circuits quantiques profonds avec un niveau d'erreur contrôlé.

- Des démonstrations techniques limitées de solveurs quantiques exacts — au sens de circuits simulant théoriquement des algorithmes comme HHL — ont été proposées sur des plateformes corrigeant partiellement les erreurs, mais ces travaux concernent exclusivement des cas de très faible dimension, souvent sans encodage complet du problème physique ou sans lecture exploitable de la solution^{202 203}. En aucun cas il ne s'agit, à ce jour, de démonstrations industrielles ou applicables à des cas concrets d'EDP réelles.
- L'implémentation pratique de tels solveurs pour des problèmes d'intérêt industriel nécessiterait non seulement plusieurs ordres de grandeur en qubits logiques, mais aussi des avancées majeures sur le front de l'input/output, de l'encodage des conditions physiques, et de la stabilité numérique. En conséquence, les projections à 5 ou même 10 ans doivent rester extrêmement prudentes quant à la possibilité d'un avantage quantique pour la résolution directe d'EDP via des circuits corrigés d'erreurs.

202 O'Brien, T. E. (2019). **Density-matrix simulation of small surface codes under realistic noise**. *npj Quantum Information*.

²⁰³ Chamberland, C. (2022). **Topological and subsystem codes on low-degree graphs with flag qubits**. *Physical Review X*, 12, 011022.

12.1.2 Objectifs algorithmiques et logiciels

Déploiement d'algorithmes hybrides spécifiques aux EDP :

- **Variational Quantum Linear Solvers (VQLS)** et **Quantum Conjugate Gradient Methods** seront de plus en plus intégrés dans les solveurs classiques via des frameworks comme PennyLane ou Qiskit Runtime.
- **Méthodes hybrides** de type **QAOA-like** pour la discrétisation adaptative et la recherche de solutions stables dans des régimes non linéaires^{204 205}.
- **Applications envisagées :**
 - Solveurs VQLS pour équations de Poisson en 1D/2D,
 - Méthode de Galerkin quantique pour problèmes elliptiques.

Développement de simulateurs et benchmarks dédiés aux EDP :

- Lancement de bancs d'essai open source (ex. **QASolver**, **EDPBenchQ**) pour tester les performances quantiques sur des instances réelles d'EDP.
- Développement de bibliothèques combinant solveurs EDP et backends quantiques (TensorFlow Quantum + FEniCS/Qiskit).

Expérimentations sur des cas d'usage concrets :

- Les **tests pratiques** commencent sur des **cas simples d'EDP**, comme les équations de diffusion ou de chaleur, utilisant des simulateurs quantiques pour effectuer des calculs préliminaires.
- Développement de **solutions hybrides** pour les premières démonstrations, permettant de tester **des algorithmes quantiques** avec des machines classiques, pour obtenir des résultats comparables aux méthodes classiques.

Développement d'algorithmes adaptés aux contraintes des machines actuelles :

- **Adaptation des algorithmes** aux machines NISQ où le nombre de qubits est limité et l'erreur doit être minimisée.
- Recherche sur les algorithmes **quantiques robustes** qui peuvent être utilisés dans un environnement de machine quantique actuel.

Émulation et estimation des ressources logiques pour la résolution complète des EDP :

L'objectif est de vérifier concrètement si l'exploitation de l'information quantique apporte un avantage réel dans la résolution des EDP. Cela inclut la préparation des couches logicielles nécessaires à la traduction des problèmes en circuits quantiques exécutables sur les ordinateurs quantiques actuels ou à venir.

- Sélection d'une bibliothèque représentative d'EDP pertinentes, incluant leurs conditions aux limites et discrétisations spatiales, dont la résolution serait envisageable avec les algorithmes quantiques présentés.
- Évaluation des indicateurs clés de performance (KPI) tels que le nombre de portes quantiques, le nombre de qubits logiques et la profondeur de circuit requis, en fonction de la résolution spatiale (finesse du maillage) et de la précision ciblée.

²⁰⁴ Bravo-Prieto, C. (2020). **Variational Quantum Linear Solver: A hybrid algorithm for linear systems**. *arXiv:1909.05820*.

²⁰⁵ Cerezo, M. (2021). **Variational quantum algorithms**. *Nature Reviews Physics*, 3, 625–644.

12.1.3 Convergence HPC–quantique

Quantique et HPC pour les EDP complexes :

- Développement de **chaînes de calcul hybrides** dans des frameworks comme HPC-QPU ou EuroHPC, associant^{206 207}:
 - Solveurs d'EDP classiques (ex. éléments finis, volumes finis),
 - Etapes critiques accélérées par circuit quantique (inversion de matrices creuses, recherche d'états propres).

Exploration des EDP non linéaires et dispersives sur architectures analogiques :

- Premiers résultats sur la simulation analogique quantique d'EDP non linéaires (équations de Korteweg–de Vries ou Schrödinger non linéaire) sur des dispositifs comme Carusotto en 2013²⁰⁸ et Mivehvar en 2021²⁰⁹:
 - Simulateurs à atomes froids,
 - Circuits supraconducteurs en régime dispersif.

Premier démonstrateur industriel basé sur le quantique :

- La mise en place d'un **projet pilote industriel** utilisant des approches hybrides quantiques pour résoudre des **problèmes d'optimisation en grande dimension** dans des domaines comme l'aéronautique ou l'automobile.

Déploiement d'approches hybrides à grande échelle :

- Mise en place de **plateformes cloud hybrides** qui permettent aux entreprises d'accéder à des solutions quantiques et classiques combinées pour résoudre des **problèmes complexes** à grande échelle, comme la simulation de **mécanique des fluides** ou l'optimisation de **réseaux d'énergie**.

12.1.4 Tableau Récapitulatif

Horizon	Technologie	Objectif scientifique	Applications cibles
1 an	NISQ	Résolution de Poisson et transport thermique	Batteries, modélisation tissulaire
2 ans	Méthodes hybrides (VQE, QAOA, VQLS)	Simulation semi-linéaire, optimisation de maillage	Finance, flux énergétiques
3 ans	FTQC (surface code expérimental)	Solveur HHL stable pour EDP linéaires couplées	Réservoirs souterrains, transport de pollution
5 ans	QPU + HPC	Couplage solveur classique et sous-routines quantiques	Aérodynamique, dynamique du climat
5 ans	Simulation analogique quantique	Équations non linéaires dispersives (KdV, NLS)	Physique des plasmas, propagation optique

Tableau 14 : Feuille de route indicative (optimiste !)

²⁰⁶ Montanaro, A. (2016). **Quantum algorithms: an overview**. *npj Quantum Information*, 2, 15023.

²⁰⁷ van Apeldoorn, J. (2020). **Quantum algorithms for linear algebra: Solving linear systems and least squares**. *Quantum*, 4, 240.

²⁰⁸ Carusotto, I. (2013). **Quantum fluids of light**. *Reviews of Modern Physics*, 85(1), 299–366.

²⁰⁹ Mivehvar, F. (2021). **Cavity QED with quantum gases: new paradigms in quantum simulation**. *Advances in Physics*, 70(1), 1–153.

12.1.5 Verrous majeurs à lever

Scalabilité :

La montée en échelle constitue un verrou central pour l'intégration du calcul quantique dans les chaînes HPC de résolution d'EDP. Les algorithmes quantiques actuels, qu'ils soient variationnels ou basés sur l'inversion de matrices, restent limités par le nombre de qubits logiques exploitables, la profondeur de circuit admissible et la sensibilité au conditionnement des opérateurs issus des discrétisations fines.

Dans les approches hybrides HPC–quantique, l'enjeu réside dans l'identification de sous-problèmes réellement accélérables (par exemple certaines inversions linéaires, calculs spectraux ou estimations de fonctionnelles), sans introduire de surcoût dominant lié au transfert de données, à la préparation d'états ou à la post-mesure.

Les réseaux de tenseurs (MPS, TT, PEPS) constituent un point de comparaison utile : ils montrent qu'une compression efficace est possible lorsque la structure du problème le permet (localité, faible intrication effective), mais ils illustrent aussi les limites fondamentales de la scalabilité en 2D/3D. Ces constats éclairent indirectement les défis similaires auxquels font face les approches quantiques, notamment en termes de croissance des ressources nécessaires avec la dimension et la complexité physique du problème.

Stabilité numérique et physique :

Au-delà de la résolution mathématique, les approches quantiques doivent préserver les propriétés physiques essentielles des systèmes modélisés, telles que les lois de conservation, la dissipation ou la stabilité dynamique. L'intégration de contraintes physiques dans des circuits quantiques bruités ou dans des schémas hybrides itératifs, demeure un défi ouvert, en particulier pour les EDP non linéaires ou multiphysiques.

Transfert vers l'industrie :

Le passage du laboratoire à l'industrie reste conditionné par la convergence de plusieurs facteurs :

- la maturité et la fiabilité des plateformes quantiques,
- la robustesse et la mesurabilité des gains apportés par les algorithmes hybrides,
- et la sélection de cas d'usage où le quantique s'insère naturellement dans des chaînes HPC existantes (par exemple mécanique des fluides, énergie, transport ou optimisation de systèmes complexes).

Sans démonstration claire d'un bénéfice opérationnel mesurable, les approches quantiques pour les EDP resteront cantonnées à des démonstrateurs exploratoires.

12.1.6 Synthèse

Les approches quantiques pour la résolution des EDP se trouvent à l'interface de plusieurs domaines : physique numérique, optimisation, théorie de la complexité et ingénierie quantique.

- **Situation actuelle :** machines limitées au régime NISQ, algorithmes variationnels sensibles au bruit, encodage des problèmes encore expérimental.

- **Objectifs de court et moyen terme** : consolidation des approches hybrides, mise en place de benchmarks représentatifs, expérimentation sur des cas concrets (équations de diffusion, de Poisson).
- **Verrous à long terme** : correction d'erreurs à grande échelle, scalabilité des méthodes d'encodage, industrialisation de démonstrateurs.

Plutôt que de projeter des échéances temporelles précises, il est plus pertinent de cartographier les défis structurants et les paliers technologiques et algorithmiques à franchir pour que les approches quantiques deviennent compétitives avec les méthodes classiques.

12.2 VISION SECTORIELLE

L'évolution rapide des technologies quantiques et des algorithmes avancés pour les EDP a un impact majeur sur plusieurs secteurs industriels. Chaque domaine voit son potentiel optimisé par l'intégration de l'informatique quantique avec des délais de résolution significativement réduits, des résultats plus précis et une exploration de nouveaux cas d'usage jusque-là inaccessibles. Cette section explore les impacts sectoriels attendus à court et moyen terme.

12.2.1 Secteur de l'Énergie (Optimisation, simulations environnementales)

Progrès attendus :

- **Court terme (1-2 ans)** : Développement de solveurs hybrides pour les équations de Navier-Stokes et de transport-réaction dans des réservoirs pétroliers et gaziers. Les EDP serviront à optimiser l'extraction des ressources tout en prenant en compte des phénomènes environnementaux complexes.
 - **Applications spécifiques** : Réduction de la consommation énergétique pour l'extraction et le traitement des hydrocarbures (calcul des phénomènes de diffusion et de convection dans les réservoirs²¹⁰).
 - **Technologie quantique appliquée** : Simulation de systèmes géophysiques en temps réel avec des solveurs hybrides quantiques, intégrant des corrections d'erreurs dans des systèmes NISQ.
- **Moyen terme (3-5 ans)** : L'utilisation de simulateurs analogiques quantiques pour prédire les interactions entre les courants océaniques et l'atmosphère, et donc mieux gérer l'intégration des énergies renouvelables sur le réseau. Ces simulateurs permettront de modéliser avec une précision sans précédent les interactions complexes dans le système climatique et de simuler des événements extrêmes.
 - **Applications spécifiques** : Prévion des effets des changements climatiques sur les réserves d'eau et d'énergie, et sur la gestion de la production en énergies renouvelables (solaire, éolien, hydrolén).
 - **Technologie quantique appliquée** : Modélisation des systèmes océaniques et atmosphériques, avec des solveurs quantiques pour les systèmes non linéaires (par exemple, les équations de diffusion et de transport dans des conditions extrêmes).

²¹⁰ Aziz, K. (1979). *Petroleum Reservoir Simulation*. Applied Science Publishers.

12.2.2 Secteur de l'Aéronautique (Optimisation des flux aérodynamiques, conception des matériaux)

Progrès attendus :

- **À court terme (1-2 ans) :** il n'est pas (encore) réaliste d'envisager une amélioration des solveurs de mécanique des fluides (CFD) grâce aux ordinateurs quantiques actuels. Les équations de Navier-Stokes, au cœur de la modélisation des flux aérodynamiques, restent hors de portée des capacités des machines NISQ ou même des premières architectures tolérantes aux fautes. La résolution efficace de ces EDP complexes nécessite des dizaines de milliers de variables, une stabilité numérique élevée et un contrôle fin des erreurs (des exigences que les machines quantiques actuelles ne peuvent pas satisfaire).
En revanche, des recherches sont en cours pour explorer, de manière exploratoire, l'intérêt d'algorithmes quantiques hybrides ou inspirés du quantique dans des tâches périphériques de l'aérodynamique, comme l'optimisation de forme. Ces approches visent à accélérer certaines boucles d'optimisation dans des chaînes de conception intégrées, mais elles reposent encore sur des simulateurs classiques dans la phase de résolution des EDP elles-mêmes.
- **Applications spécifiques :** Optimisation des configurations aérodynamiques des nouvelles générations de moteurs à faible consommation.
- **Technologie quantique appliquée :** VQLS pour résoudre les problèmes de mécanique des fluides (Navier-Stokes), combinés avec des algorithmes de gradient pour l'optimisation de la forme des surfaces.
- **Moyen terme (3-5 ans) :** Intégration de la **simulation quantique analogique** pour le calcul des coefficients de résistance à la chaleur dans des matériaux avancés pour l'aéronautique. L'utilisation de simulateurs quantiques pour modéliser des matériaux à l'échelle atomique pourrait révolutionner la conception de matériaux composites ultra-résistants et légers.
- **Applications spécifiques :** Conception de matériaux résistants à des températures extrêmes dans les moteurs à jet et les turbines à gaz.
- **Technologie quantique appliquée :** Simulations des interactions électroniques dans des matériaux composites, en utilisant des systèmes de qubits analogiques pour modéliser les interactions entre les atomes.

12.2.3 Secteur de la Finance (Valorisation d'options, gestion de risques)

Progrès attendus :

- **Court terme (1-2 ans) :** Le développement des algorithmes inspirés du quantique à base de réseaux de tenseurs notamment sont certainement ceux qui sont les plus matures et susceptibles d'apporter une valeur ajoutée numérique à court terme. En particulier, ses techniques permettent de restreindre l'information à sa partie réellement utile. Cette frugalité associée aux méthodes de génération et de manipulation des réseaux de tenseurs accélère considérablement l'efficacité numérique de ces algorithmes tant dans leur occupation mémoire que dans leur complexité entendue comme le nombre d'opérations élémentaires mises en jeu. Le périmètre d'application de ces méthodes est vaste. Elles peuvent s'appliquer à la représentation et la manipulation des fonctions en grandes dimensions, à leurs dérivées et intégrales. Elles offrent de nouveaux schémas de résolution des EDP. Elles trouvent également des usages dans l'optimisation des algorithmes d'apprentissage profond, domaine

de la recherche très actif y compris pour la résolution des EDP ou dans les méthodes de simulation exactes. Enfin, le lien entre réseaux de tenseurs et algorithmes quantiques fondés sur des portes construit un pont naturel et fécond entre informatique classique et quantique. La physique quantique a fait émerger les algorithmes classiques de manipulation des réseaux de tenseurs, ceux-ci pourraient à leur tour stimuler la créativité en matière d’algorithmes quantiques.

- **Moyen terme (3-5 ans) :** Intégration progressive des accélérations quantiques dans les processus financiers, via des algorithmes quantiques hybrides combinant simulations classiques et quantiques pour la résolution d’EDP complexes à plusieurs facteurs. L’amélioration du matériel quantique et des oracles spécifiques permettra d’adresser des modèles financiers plus réalistes, y compris ceux avec des dynamiques non linéaires et des volatilités stochastiques.
 - **Applications spécifiques :** Valorisation rapide et plus précise de produits dérivés exotiques, gestion dynamique des portefeuilles à risques complexes, et modélisation avancée des marchés par simulations quantiques stochastiques.
 - **Technologie quantique appliquée :** Déploiement de circuits quantiques optimisés basés sur les réseaux de tenseurs, amélioration des méthodes de simulation d’Hamiltoniens financiers, et utilisation croissante des algorithmes de phase quantique pour l’estimation spectrale dans l’évaluation des risques.

12.2.4 Secteur de la Santé (Modélisation des tissus biologiques, génétique)

Progrès attendus :

- **Court terme (1-2 ans) :** les ordinateurs quantiques n’apporteront pas encore de gains concrets pour la résolution des équations de transport utilisées en modélisation biologique, comme la diffusion de molécules à travers les membranes cellulaires. Si ces applications sont bien identifiées, notamment en lien avec la conception de médicaments ou la modélisation tissulaire, leur traitement nécessite des schémas numériques fins, une précision élevée et une capacité de gestion des conditions aux limites encore hors de portée des machines actuelles.
 - **Applications spécifiques :** Optimisation des traitements en génomique, calcul des dynamiques moléculaires pour la recherche de médicaments.
 - **Technologie quantique appliquée :** Algorithmes VQE pour résoudre les équations de diffusion stochastique et optimiser les traitements médicamenteux en fonction des caractéristiques biologiques individuelles.
- **Moyen terme (3-5 ans) :** Simulations quantiques pour l’analyse des **flux sanguins** et la modélisation de l’électrophysiologie. Des algorithmes quantiques avancés permettront de résoudre des EDP non linéaires et des systèmes couplés pour analyser les comportements complexes des tissus vivants.
 - **Applications spécifiques :** Analyse des écoulements sanguins dans les artères, modélisation des réseaux neuronaux pour mieux comprendre les pathologies.
 - **Technologie quantique appliquée :** Simulations des interactions moléculaires à l’échelle atomique, résolution de systèmes d’EDP complexes via des techniques hybrides.

12.2.5 Tableau Récapitulatif

Secteur	Progrès attendu (1-2 ans)	Progrès attendu (3-5 ans)	Technologie quantique appliquée
Énergie	Optimisation des réservoirs (Navier-Stokes, transport)	Simulation du climat et des énergies renouvelables	Méthodes hybrides et simulateurs analogiques
Aéronautique	Optimisation aérodynamique, gestion thermique	Simulation de matériaux à haute température	VQLS, calcul thermique de surfaces aérodynamiques
Finance	Valorisation des produits dérivés, évaluation des risques	Simulation de marché, prévision des fluctuations de prix	QAOA, VQE, algorithmes stochastiques quantiques
Santé	Optimisation des traitements médicamenteux	Simulation des réseaux neuronaux, analyse des tissus	Algorithmes VQE, simulation de diffusion moléculaire

Tableau 15 : récapitulatif – Applications sectorielles à court et moyen terme.

Afin de mieux structurer les perspectives liées à l'émergence des approches quantiques pour la résolution des EDP, nous proposons ci-dessous un tableau synthétique évaluant, pour chaque jalon technologique, les horizons temporels plausibles, les probabilités de succès estimées, les principaux verrous techniques à surmonter, les risques associés, ainsi que le niveau actuel de mobilisation des partenaires. Cet outil vise à éclairer les décisions stratégiques et à favoriser une feuille de route concertée.

Étape / Capacité technologique	Échéance estimée	Probabilité de succès à l'échéance	Verrous techniques	Risques
1. Premiers solveurs NISQ stables pour petits systèmes d'EDP	2026–2028	Moyenne (~60 %)	Bruit, profondeur de circuit, limitation I/O, manque d'oracles efficaces	Résultats non généralisables, surcoûts de mise en œuvre
2. Algorithmes hybrides (VQLS, QITE) démontrés sur cas semi-réels	2027–2029	Moyenne (~50 %)	Cohérence partielle, I/O bottleneck, calibration de paramètres hybrides	Manque d'intérêt applicatif, calcul classique plus efficace
3. Simulations quantiques analogiques sur systèmes physiques ciblés	2028–2030	Moyenne (~40 %)	Design spécifique, absence de reprogrammabilité, faible généralisation	Risques de non-reproductibilité et faible robustesse
4. Résolution de grandes EDP linéaires sur machines FTQC	>2033	Faible à ce stade (~20 %)	Nécessite >10 ⁵ qubits physiques, correction d'erreur complète, contrôle optique	Horizon incertain, investissement massif sans retour court terme
5. Orchestration multi-cœur quantique avec mémoire partagée	>2035	Très faible à ce stade (<10 %)	Interconnexion quantique stable, QRAM, goulot I/O massif	Risque de décrochage technologique européen

Tableau 16 : Prévision de la maturité du quantique pour les EDP — hypothèses, risques et positionnement des partenaires

Note méthodologique – Interprétation des probabilités et des horizons temporels

Les probabilités de succès et les échéances temporelles présentées dans le tableau de feuille de route ne doivent pas être interprétées comme des prédictions au sens strict. Elles constituent des **estimations conditionnelles**, construites à partir de l'état actuel des connaissances scientifiques, des feuilles de route industrielles publiques, et des verrous technologiques identifiés à ce jour.

Ces probabilités expriment un **degré de plausibilité** sous hypothèse que plusieurs conditions critiques soient simultanément remplies, notamment :

- des progrès continus sur le matériel quantique (fidélité des opérations, stabilité, mise à l'échelle) ;
- la disponibilité d'algorithmes adaptés aux contraintes physiques réelles des machines ;
- la maîtrise des problèmes d'entrée/sortie (I/O bottleneck), de préparation d'états et de lecture des résultats ;
- l'existence de cas d'usage industriels pour lesquels un avantage quantique mesurable est pertinent.

Il est important de souligner que l'évolution des technologies quantiques est **non linéaire**, sujette à des ruptures scientifiques imprévisibles, mais également à des ralentissements liés à des contraintes physiques fondamentales. À ce titre, les échéances indiquées doivent être comprises comme des **fenêtres de maturité potentielles**, et non comme des jalons garantis.

Enfin, ces scénarios n'intègrent volontairement pas de facteurs exogènes difficiles à quantifier, tels que :

- les évolutions réglementaires,
- les choix stratégiques des acteurs industriels,
- où les dynamiques de financement public et privé.

L'objectif de ce tableau n'est donc pas de fixer une trajectoire déterministe, mais de fournir un **outil d'aide à la décision**, permettant aux acteurs industriels, académiques et institutionnels de positionner leurs efforts de recherche, d'investissement et de coopération face aux incertitudes inhérentes au développement du calcul quantique appliqué aux EDP.

13. CONCLUSIONS

13.1 EXPLORATION DES NOUVELLES METHODES ET LEUR POTENTIEL TRANSFORMATEUR

Les défis liés à la résolution des Équations aux Dérivées Partielles dans des domaines complexes comme la dynamique des fluides, la modélisation des matériaux ou encore la simulation des systèmes physiques non linéaires, sont multiples. Traditionnellement, des méthodes numériques classiques comme les différences finies, les éléments finis ou les volumes finis ont été utilisées pour résoudre ces problèmes. Cependant, ces approches atteignent leurs limites dès que la taille du problème ou la complexité des systèmes dépasse certaines frontières. L'avènement de nouvelles méthodes de calcul, notamment par l'usage des ordinateurs quantiques et des réseaux de tenseurs, promet de transformer cette situation en permettant de surmonter les contraintes liées à la dimensionnalité et à la complexité des systèmes.

13.2 NISQ ET FTQC : ÉTAT DE LA RECHERCHE ET LIMITES ACTUELLES

L'un des points clés abordés dans ce livre blanc est l'impact potentiel des ordinateurs quantiques, en particulier les ordinateurs NISQ et FTQC. Les NISQ, bien qu'ils représentent un progrès dans le domaine du calcul quantique, sont encore confrontés à de nombreux défis, principalement liés au bruit et à la décohérence. Ces limitations rendent leur application aux EDP encore incertaine. Cependant, des recherches récentes ont montré que, même avec des erreurs, les NISQ peuvent offrir des avantages dans certaines situations, comme la simulation de modèles simples de fluides ou la recherche de solutions approximatives à des systèmes non linéaires.

À terme, les ordinateurs FTQC devraient offrir des garanties beaucoup plus fortes en termes de précision, de robustesse et de capacité à résoudre des EDP de grande envergure. Les travaux de John Preskill et d'autres chercheurs sur la correction d'erreurs quantiques et l'optimisation des algorithmes quantiques dans le cadre de la computation tolérante aux fautes ouvrent la voie à des applications futures prometteuses. Les défis actuels, bien qu'importants, devraient être surmontés dans les 5 à 10 prochaines années avec les progrès continus en matière de matériel et d'algorithmes quantiques.

13.3 L'IMPORTANCE D'UNE APPROCHE HYBRIDE : IA, QUANTIQUE ET RESEAUX DE TENSEURS

Une des pistes prometteuses explorées dans ce livre blanc réside dans l'intégration des technologies de calcul quantique avec des approches d'IA et de réseaux de tenseurs. Cette convergence technologique permettrait de surmonter les limitations actuelles des systèmes classiques et d'offrir une nouvelle manière de résoudre des EDP en exploitant à la fois la puissance des algorithmes quantiques et l'efficacité des réseaux neuronaux.

Les réseaux de tenseurs, inspirés des méthodes de factorisation matricielle et des réseaux neuronaux profonds, sont particulièrement adaptés à la modélisation de systèmes complexes en raison de leur capacité à capturer des relations non linéaires et à traiter de grandes quantités de données. Lorsqu'ils sont combinés avec des algorithmes quantiques, comme les algorithmes de Grover ou les marches quantiques, ces réseaux pourraient permettre d'améliorer les performances des solutions numériques classiques pour les EDP, en particulier dans des domaines comme la dynamique des fluides ou la simulation de systèmes thermodynamiques.

Des travaux comme ceux menés par Google avec son projet *TensorFlow Quantum* et par Microsoft avec *Q#* illustrent bien l'énorme potentiel de ces approches hybrides. Par exemple, dans le cadre de la mécanique des fluides, des algorithmes hybrides peuvent permettre de simuler les équations de Navier-Stokes avec une précision accrue tout en réduisant le temps de calcul nécessaire pour de grandes échelles de simulation.

13.4 LA NECESSITE D'UN ECOSYSTEME COLLABORATIF

Afin de débloquent tout le potentiel des EDP quantiques, il est essentiel de créer un écosystème collaboratif entre les secteurs académiques, industriels et institutionnels. Des initiatives telles que le programme **Quantum Flagship** de l'Union Européenne et le **Quantum National Programme** lancé par le gouvernement français en 2021 illustrent cette dynamique. Ces programmes ont pour but de renforcer les collaborations entre les chercheurs, les entreprises et les agences publiques, et de permettre le passage à l'échelle industrielle des technologies quantiques.

L'industrie de l'énergie, en particulier, pourrait bénéficier considérablement des EDP quantiques, notamment pour la modélisation avancée des réservoirs pétroliers ou la simulation des processus de transition énergétique. Des entreprises comme TotalEnergies et EDF, en collaboration avec des chercheurs du CNRS et du CEA, explorent déjà des solutions quantiques pour la simulation de systèmes dynamiques complexes comme la circulation des fluides dans les sols ou les comportements des matériaux sous stress thermique. Ces initiatives montrent l'importance d'une coopération renforcée pour surmonter les défis de la recherche appliquée.

13.5 L'IMPORTANCE D'UNE EXPLORATION LARGE DE L'ORDINATEUR QUANTIQUE

L'un des principaux enjeux de la recherche sur les EDP quantiques réside dans la nécessité d'explorer de manière systématique et large le potentiel des ordinateurs quantiques, non seulement pour des applications très spécifiques mais aussi pour des systèmes plus larges et interconnectés. Les approches hybrides, combinant des algorithmes classiques et quantiques, sont particulièrement adaptées à cette exploration. En combinant la puissance de calcul d'un ordinateur quantique avec la flexibilité et la richesse des approches classiques, il devient possible d'explorer des systèmes physiques d'une manière jusque-là inenvisageable.

Les recherches menées par des groupes comme celui de l'Université de Harvard et le laboratoire de Physique de l'ENS Paris montrent que l'utilisation de l'ordinateur quantique pour résoudre des EDP complexes est loin d'être une utopie. L'extension de ces travaux à des cas industriels et à des simulations de systèmes réels nécessitera des investissements significatifs dans la recherche et des partenariats internationaux pour permettre une exploitation à large échelle de l'informatique quantique.

13.6 REFLEXION SUR LES METHODOLOGIES DE MACHINE LEARNING POUR RESOUDRE DES EDP

Le lien entre les EDP et les méthodes de machine learning représente également un axe de recherche passionnant et un angle d'attaque inédit pour la résolution de ces équations. En particulier, les réseaux neuronaux et autres modèles d'apprentissage profond sont capables de capturer des patterns complexes dans des systèmes de grande dimension. Des études comme celle menée par Raissi en 2019²¹¹ sur la *Physics-Informed Neural Networks* (PINNs) montrent que des réseaux de neurones peuvent être entraînés pour approximer des solutions aux EDP sans avoir besoin de maillages prédéfinis, une avancée majeure pour des problèmes de grande échelle.

Cette approche pourrait compléter ou même, dans certains cas, remplacer des méthodes classiques de résolution, tout en offrant une alternative plus flexible et plus rapide pour des applications industrielles dans des domaines comme la simulation des matériaux, l'aérodynamique, et les prévisions climatiques.

²¹¹ Raissi, M. (2019). **Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations**. *Journal of Computational Physics*, Volume 378, pp. 686–707.

13.7 LE BESOIN DE PENSER DIFFEREMMENT POUR DE NOUVELLES APPROCHES

Pour qu'une véritable révolution se produise dans le domaine de la résolution des EDP, il est impératif de repenser les approches actuelles et d'adopter des paradigmes nouveaux. Plutôt que de s'appuyer uniquement sur des méthodes classiques, les chercheurs doivent explorer des solutions hybrides, où le quantique, les réseaux de tenseurs et l'intelligence artificielle collaborent pour résoudre des problèmes qui étaient auparavant inaccessibles. En ce sens, la combinaison de l'intelligence artificielle et de l'informatique quantique représente une opportunité sans précédent pour aller au-delà des limites actuelles de la simulation et du calcul scientifique.

13.8 IMPACT GLOBAL DES NOUVELLES APPROCHES SUR LES SCIENCES ET L'INDUSTRIE

Les avancées récentes en informatique quantique, couplées à l'émergence de nouvelles approches algorithmiques, transforment profondément les paradigmes de résolution des Équations aux Dérivées Partielles (EDP). Ces évolutions ouvrent de nouvelles perspectives dans des domaines scientifiques et industriels variés, allant de la modélisation des matériaux à la simulation des systèmes biologiques complexes.

13.8.1 Révolution dans la simulation des matériaux et de la chimie quantique

L'informatique quantique offre un potentiel considérable pour la simulation de systèmes quantiques complexes, tels que les molécules et les matériaux à l'échelle atomique. Des entreprises comme Google ont récemment dévoilé des puces quantiques capables d'effectuer des calculs en quelques minutes, des tâches qui prendraient « des milliards d'années » aux ordinateurs classiques²¹². Cette avancée pourrait révolutionner la conception de nouveaux matériaux et médicaments.

Par ailleurs, le prix Nobel de chimie 2023 a été attribué pour les travaux sur les boîtes quantiques, des nanocristaux ayant des applications dans les écrans, l'optoélectronique et la biologie, illustrant l'impact croissant des technologies quantiques dans ces domaines.

13.8.2 Implications pour la santé et les sciences de la vie

L'informatique quantique pourrait transformer la recherche biomédicale en permettant la simulation précise de structures moléculaires complexes. Cela pourrait accélérer la découverte de nouveaux médicaments et améliorer la personnalisation des traitements. Des entreprises comme IBM collabore avec des institutions de santé pour explorer ces applications, bien que la transition vers des prototypes à grande échelle soit encore en développement.

13.8.3 Défis et perspectives pour l'industrie

Malgré les progrès réalisés, l'adoption généralisée de l'informatique quantique dans l'industrie rencontre plusieurs obstacles, notamment la correction d'erreurs quantiques, la scalabilité des qubits et les défis liés à l'intégration dans les infrastructures existantes. Cependant, les investissements dans ce domaine sont en forte croissance, avec des projections estimant que le marché de l'informatique quantique pourrait atteindre jusqu'à 850 milliards de dollars d'ici 2040.

²¹² Après l'annonce de Google en 2019 sur la suprématie quantique, ce résultat reste contesté et discuté, mais constitue un premier pas. Depuis, les progrès matériels et algorithmiques ont permis des démonstrations à petite échelle, mais les défis restent importants. Les feuilles de route prévoient une montée en puissance progressive d'ici 2030.

14. ANNEXES

Les annexes rassemblent des développements complémentaires, des matériaux techniques et des exemples détaillés destinés aux lecteurs souhaitant approfondir certains points méthodologiques ou applicatifs.

14.1 GLOSSAIRE

FTQC	Fault-Tolerant Quantum Computing	Calcul quantique tolérant aux fautes
HHL	Harrow–Hassidim–Lloyd algorithm	Algorithme d’Harrow–Hassidim–Lloyd
LSQ	Large Scale Quantum	Quantique à grande échelle
NISQ	Noisy Intermediate-Scale Quantum	Ordinateur quantique imparfait (bruité) de taille intermédiaire
PINNs	Physics-Informed Neural Networks	Réseaux de neurones informés par la physique
QLBM	Quantum Lattice Boltzmann Method	Méthode de Boltzmann sur réseau quantique
QMC	Quantum Monte Carlo	Monte Carlo quantique
QML	Quantum Machine Learning	Apprentissage automatique quantique
QAOA	Quantum Approximate Optimization Algorithm	Algorithme d’optimisation approximative quantique
QUBO	Quadratic unconstrained binary optimization	Optimisation binaire quadratique sans contrainte
VQA	Variational Quantum Algorithms	Algorithmes quantiques variationnels
VQLS	Variational Quantum Linear Solver	Solveur linéaire quantique variationnel

14.2 LISTE DES FIGURES

Figure 1 : Graphique d'une solution de l'équation de la chaleur dans une dimension au fil du temps.	23
Figure 2 : Profil de température dans un pack de batteries à refroidissement liquide.	24
Figure 3 : Simulation de la chaîne de contamination du CoViD en France (sans confinement).	25
Figure 4 : Visualisation de la formule de Black-Scholes pour un prix initial de $S_0 = 100$, une dérive de 0.04 et une volatilité $\sigma = 0.15$ sur une centaine de tirages.	26
Figure 5 : Écoulement après l'obstacle en fonction du nombre de Reynolds.	28
Figure 6 : Simulation du véhicule hypersonique NASA X-43 Scramjet, utilisant un code de Mécanique des Fluides Numérique.	28
Figure 7 : Distribution de pression dans l'habitacle d'une voiture générée à 3 kHz par un haut-parleur médium situé dans la porte.....	29
Figure 8 : Propagation d'une onde Wi-Fi dans un appartement. Sous la simulation est affiché le plan de l'appartement et la position du routeur (petit disque à gauche).	30
Figure 9 : Oscillations de plasma générées par des particules de hautes énergies dans le LHD.	32
Figure 10 : Graphe comparatif illustrant les exigences relatives en mémoire, temps de calcul et difficulté pour différents types d'EDP.....	35
Figure 11 : Maillage utilisé et solution bidimensionnelle d'une équation magnétostatique obtenue par éléments finis (les lignes donnent la direction du champ et la couleur son intensité).	37
Figure 12 : Différence entre la FDM, la FEM et la FVM.	38
Figure 13 : Profit d'une option d'achat (call option) et d'une option de vente (put option) en fonction de la prime initialement payée, du strike et du prix de l'action sous-jacente.	51
Figure 14 : Algorithme VQA (Source interne).....	61

Figure 15 : Algorithme QAOA (Source interne)	62
Figure 16 : Conditions aux limites de Dirichlet et de Neumann.	73
Figure 17 : Circuit VQLS (Source interne)	81
Figure 18 : Approches quantiques possibles en fonction du type d'EDP	88
Figure 19 : Représentation de tenseurs.	98
Figure 20 : Exemple de la contraction d'un tenseur C d'ordre 4 en un réseau de 2 tenseurs A et B d'ordre 3.	99
Figure 21 : Schéma de principe pour les réseaux de tenseurs (Source interne)	100
Figure 22 : Architectures de réseaux de tenseurs.	100

14.3 LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1 : Contraintes computationnelles selon le type d'EDP	34
Tableau 2 : Récapitulatif des différentes méthodes	39
Tableau 3 : Caractéristiques des différentes méthodes numériques	44
Tableau 4 : Récapitulatif des méthodes classiques en fonction des EDP	45
Tableau 5 : Schémas de discrétisation	47
Tableau 6 : Limitations des approches classiques	49
Tableau 7 : Limites fondamentales dans la résolution numérique	49
Tableau 8 : Consommation mémoire typique par méthode et dimension.	49
Tableau 9 : Synthèse des méthodes et plateformes quantiques appliquées aux EDP : état actuel	85
Tableau 10 : Classification des algorithmes quantiques (Preskill, 2018)	91
Tableau 11 : Comparaison des coûts classiques et quantiques (FTQC) pour la résolution d'EDP	93
Tableau 12 : Comparaison des limitations des méthodes classiques, quantiques et tensorielles	109
Tableau 13 : Limites théoriques et pratiques – Résumé par dimension	111
Tableau 14 : Feuille de route indicative (optimiste !)	119
Tableau 15 : récapitulatif – Applications sectorielles à court et moyen terme	124
Tableau 16 : Prévion de la maturité du quantique pour les EDP — hypothèses, risques et positionnement des partenaires	124

14.4 EXPLORATION DE NOUVELLES APPROCHES : DU QUANTIQUE AUX RESEAUX DE TENSEURS

14.4.1 Vers une hybridation quantique ?

Plusieurs pistes de recherche émergent pour **hybrider ces méthodes avec des approches quantiques** ou inspirées du quantique. Ces pistes peuvent se structurer autour des axes suivants :

➔ Estimation quantique de noyaux de Green

La fonction de Green agit comme un **noyau** reproduisant, ce qui ouvre la voie à une interprétation en **apprentissage machine quantique** via les « **quantum kernel methods** ». Des circuits quantiques pourraient permettre :

- Une **approximation de $G(x, y)$** par des états quantiques superposés encodant les sources,
- Une **accélération de l'intégration** via des algorithmes de type **quantum Monte Carlo**,
- L'encodage simultané de nombreuses sources et positions dans un **registre quantique compressé**.

➔ Approximation tensorielle ou réseau de neurones quantiques

Des travaux récents cherchent à approximer les fonctions de Green par :

- Des **réseaux de tenseurs (Tensor Trains, MPS)**,
- Des **quantum neural networks** entraînés à reproduire les réponses du système différentiel,
- Des **modèles hybrides classiques/quantique** construisant une base réduite des interactions par apprentissage.

➔ **Simulation analogique des interactions multipolaires**

Dans les simulateurs quantiques analogiques (pièges d'ions, réseaux de cavités), certains dispositifs physiques permettent de simuler naturellement des **interactions à longue portée**, notamment des couplages effectifs analogues à des interactions de type coulombien ou multipolaire, telles qu'elles apparaissent dans les formulations intégrales des EDP.

Il est envisagé d'exploiter ces plateformes pour simuler directement, **en régime analogique**, des opérateurs intégrales associés aux équations de Poisson, de Laplace ou de Helmholtz :

- les termes multipolaires seraient encodés dans les configurations collectives d'ions ou de modes de cavité ;
- les interactions effectives et les transitions énergétiques reproduiraient les effets collectifs du champ et des sources distribuées ;

Cette approche ouvre la voie à des concepts exploratoires de type Quantum Fast Multipole Method (QFMM), visant une émulation quantique analogique des algorithmes multipolaires rapides classiques, sans discrétisation explicite du noyau intégral.

➔ **Quantum FMM (QFMM) : vers une version quantifiée du multipôle rapide**

Des propositions conceptuelles ont été formulées pour des algorithmes de type **Quantum Fast Multipole Method (QFMM)**, combinant :

- Une **compression de l'espace source** par **quantum low-rank approximations**,
- Des **algorithmes de regroupement adaptatif** via circuits quantiques (quadtree sur registres),
- Un contrôle précis des **erreurs d'approximation** via post-traitement classique.

Ces méthodes n'en sont qu'à l'état théorique, mais pourraient constituer à terme un **nouveau paradigme de calcul hybride** pour les problèmes de champ à longue portée.

Elles représentent une **brique algorithmique puissante** pour la résolution d'EDP linéaires, mais leur adaptation aux grands systèmes et aux nouveaux modèles reste coûteuse. Les approches quantiques offrent **de nouvelles perspectives** pour leur compression, leur approximation et leur simulation physique directe. L'avenir se situe probablement dans **des architectures hybrides**, combinant :

- Pré-traitements ou réductions de modèle classiques (bases réduites, compression),
- Étapes d'évaluation intégrale sur **co-processeurs quantiques** spécialisés,
- Post-traitements classiques intégrés aux chaînes de simulation.

14.5 EXEMPLE CHIFFRE : RESOLUTION DE L'EQUATION DE POISSON 1D PAR L'ALGORITHME DE HHL

Problème de départ (continu)

Considérons le problème de Poisson sur $[0,1]$ avec conditions de Dirichlet homogènes :

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = f(x), \quad u(0) = u(1) = 0$$

avec par exemple $f(x) = \sin(\pi x)$, dont la solution exacte est $u(x) = \frac{\sin(\pi x)}{\pi^2}$.

Étape 1 : Discrétisation par différences finies

On utilise une discrétisation à $N = 4$ points internes (5 points au total, avec $h = \frac{1}{5}$) :

$$-\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} = f_i, \quad i = 1, \dots, 4$$

Cela donne un système linéaire $A\vec{u} = \vec{b}$, avec :

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad h = \frac{1}{5}, \Rightarrow \frac{1}{h^2} = 25$$

On a donc un système :

$A = 25 \cdot L$, où L est la matrice tridiagonale standard.

Le second membre $b_i = f(x_i)$ avec $x_i = ih$ est calculé numériquement (par ex. $f_i = \sin(\pi x_i)$).

Étape 2 : Préparation de l'état $|b\rangle$

On forme le vecteur $\vec{b} = (b_1, b_2, b_3, b_4)$, et on le normalise :

$$|b\rangle = \frac{1}{|\vec{b}|} \sum_{i=0}^3 b_i |i\rangle$$

Ce vecteur est encodé dans 2 qubits ($2^2 = 4$ amplitudes). La préparation de cet état peut se faire :

- soit par un circuit à base de rotations conditionnelles (ex. méthode d'arbre de Mottonen),
- soit par chargement à partir d'un registre mémoire (QRAM), mais cela est hors de portée des NISQ actuels.

Étape 3 : Encodage de la matrice A

On considère la matrice A comme étant sparse, hermitienne, diagonalisable. Pour l'algorithme HHL, on encode son action via simulation hamiltonienne :

- Soit via Trotter-Suzuki,
- Soit via block encoding : on trouve une unité U avec $\alpha = |A|$.

On suppose ici qu'un block encoding efficace de A est fourni, par exemple via QSVT avec un ancilla.

Étape 4 : Exécution de l'algorithme HHL

L'algorithme HHL fonctionne selon les étapes suivantes :

- Estimation de phase quantique (QPE) sur le registre $|b\rangle$ pour extraire les valeurs propres $i\lambda_i$ de A ,
- Inversion conditionnelle des phases avec circuits contrôlés,
- Démesurage des ancillas et retour à l'espace solution.

À l'issue, on obtient l'état de la solution normalisée.

Étape 5 : Lecture de la solution

On peut :

- soit extraire une observable (par ex. une composante de la solution) : $\langle x | M | x \rangle$,
- soit utiliser des techniques de tomographie pour approximer les composantes de $\vec{u}$,
- soit utiliser amplitude estimation pour reconstruire certaines propriétés globales de la solution (normes, intégrales...).

Commentaires pratiques

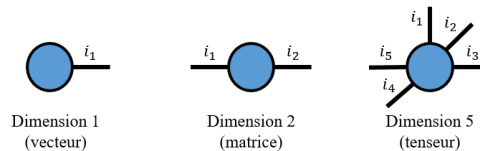
- Le coût de ce circuit croît avec le conditionnement de A et la précision visée.
- Les méthodes variationnelles (VQLS) évitent certaines étapes de l'HHL, en optimisant directement un état $|x\rangle$ paramétré par des portes $U(\theta)$, mais au prix d'heuristiques supplémentaires.
- Sur machines NISQ, ce genre de démonstration reste possible pour $N \leq 4$ à 8. Pour aller au-delà, des techniques de réduction de dimension, de préconditionnement ou de compression tensorielle peuvent être couplées.

14.6 RESEAU DE TENSEURS – PRECISIONS

Un tenseur est un tableau multidimensionnel d'éléments d'un corps commutatif donné (disons $\mathbb{R}$ ou $\mathbb{C}$). Un tenseur de dimension 1 est un vecteur d'éléments, un tenseur de dimension 2 est une matrice d'éléments, etc. Par convention, un tenseur de dimension 0 est un simple élément de l'espace.

Un élément d'un tenseur A de dimension d est identifié par son rang dans chacune des dimensions : $a_{i_1, \dots, i_d}$ est l'élément de A qui se range à la position $i_k \in \{1, \dots, n_k\}$ de la k ème dimension de A .

On associe à un tenseur une représentation graphique figurant le tenseur par une forme quelconque (ici des ronds bleus) dotée d'un nombre d'arêtes, égal à sa dimension, issues de cette forme :



Opérations sur les tenseurs :

Réorganisation (reshape) : il s'agit de transformer un tenseur de dimension d en un tenseur de dimension d' . Cette transformation n'est pas définie de manière univoque. La seule contrainte qu'une opération de réorganisation d'un tenseur doit respecter est la conservation du nombre d'élément par cette transformation. Plus formellement, si on réorganise un tenseur A de dimension d en un tenseur A' de dimension d' alors le nombre d'éléments de ces deux tenseurs doit être égale :

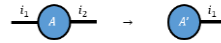
$$\prod_{k=1}^d n_k = \prod_{k=1}^{d'} n'_k$$

La figure ci-dessous illustre la réorganisation d'une matrice en vecteur :

$$A \in \mathbb{R}^{2 \times 3}, A' \in \mathbb{R}^{1 \times 6}, \quad A' = \text{reshape}(A; 1 \times 6)$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix} \rightarrow [a_{11} \ a_{12} \ a_{13} \ a_{21} \ a_{22} \ a_{23}] \rightarrow [a'_1 \ a'_2 \ a'_3 \ a'_4 \ a'_5 \ a'_6] = A'$$

La représentation graphique cette réorganisation est :



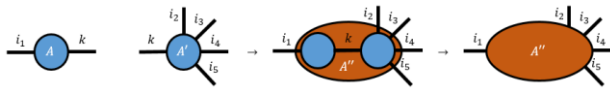
Notons que toute opération de réorganisation est inversible.

Connexion : si deux tenseurs $A = [a_{i_1, \dots, i_d}]$ et $A' = [a'_{i_1, \dots, i_{d'}}]$ disposent d'une dimension (disons p et q respectivement) de même taille $n_p = n'_q = n$ alors ils peuvent être connectés pour former un nouveau tenseur $A'' = [a''_{i_1, \dots, i_{d+d'-2}}]$ défini par :

$$a''_{i_1, \dots, i_{d+d'-2}} = \sum_{k=1}^n a_{i_1, \dots, i_{p-1}, k, i_{p+1}, \dots, i_d} \times a'_{i_{d+1}, \dots, i_{d+q-1}, k, i_{d+q+1}, \dots, i_{d'}}$$

Ainsi, un produit scalaire est une opération de connexion de deux tenseurs de dimension 1 de même taille, un produit de matrice est la matrice résultant de la connexion de deux matrices etc.

L'opération de connexion se représente graphiquement comme la mise en commun d'une arête par deux tenseurs :

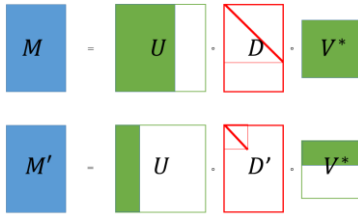


Avec l'opération de connexion on peut construire des réseaux de tenseurs (*tensor networks*) constitués de tenseurs dont les dimensions permettent cette mise en réseau.

Contraction : il est toujours possible de réorganiser un tenseur quelconque en un tenseur de dimension 2 (en observant qu'un vecteur est une matrice dont l'une des dimensions est de taille 1). L'opération de contraction repose sur la décomposition en valeurs singulières (singular value decomposition – SVD).

Rappelons que si M est une matrice $m \times n$ dont les coefficients appartiennent au corps K , où $K = \mathbb{R}$ ou $K = \mathbb{C}$. Alors il existe une factorisation de la forme : $M = U D V^*$ avec U une matrice unitaire $m \times m$ sur K , D une matrice $m \times n$ dont les coefficients diagonaux sont des réels positifs ou nuls et tous les autres sont nuls, et V^* est la matrice adjointe à V , matrice unitaire $n \times n$ sur K . On appelle cette factorisation la décomposition en valeurs singulières de M .

Une opération de contraction d'une matrice M est la matrice $M' = U D' V^*$ où D' s'obtient à partir de D en annulant tous les termes de norme inférieure à un niveau donné. On parle de contraction parce que l'information utile pour reconstituer M' (à partir de U , D' et V) est moindre que pour M . C'est ce qu'illustre la figure ci-dessous :

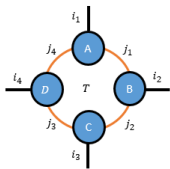


Cette opération n'est pas inversible mais une opération de réorganisation inverse permet de revenir à un tenseur de mêmes dimensions qu'initialement.

Définition d'un réseau de tenseurs

Nous avons vu qu'un réseau de tenseurs est un tenseur résultant de la connexion de tenseurs compatibles. Une différence notable entre un réseau de tenseurs et le tenseur résultant réside dans la taille de l'information portée par leur représentation respective.

Pour illustrer ce point, considérons un réseau de tenseurs constitué des tenseurs $[A_{i_1 j_1 j_2}]$, $[B_{i_2 j_2 j_3}]$, $[C_{i_3 j_3 j_4}]$ et $[D_{i_4 j_4 j_1}]$ qui forment le tenseur $[T_{i_1 i_2 i_3 i_4}]$ comme le présente la figure ci-dessous :

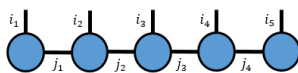


Supposons que les indices i soient de taille n et que les indices j soient de taille m , l'information nécessaire pour représenter $[T_{i_1 i_2 i_3 i_4}]$ est de taille n^4 et celle du réseau de tenseur est de taille $4 \times n \times m^2$.

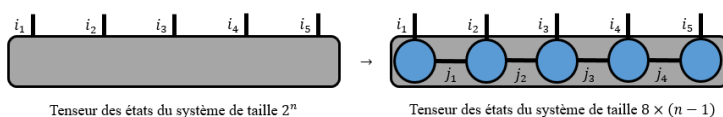
Ainsi, si l'on doit manipuler un tenseur de trop grande taille, on peut approcher celui-ci par un réseau de tenseur plus frugal en information et qui conserve la structure « externe » du tenseur. C'est le cas par exemple du problème à n corps. Il s'agit de représenter les états d'un système de n corps dont chacun possède deux états. Les états du système sont au nombre de 2^n ce qui ne peut se manipuler pour n suffisamment grand.

Le choix de l'architecture du réseau de tenseur pour représenter un tenseur de grande taille est une question profonde. Plusieurs formes ont été étudiées dans la littérature.

Train de tenseurs (Tensor Train (TT) or Matrix Product State (MPS)) : une architecture en train de tenseurs est une chaîne de tenseurs de dimension 3 connectés, fermée aux extrémités par deux tenseurs de dimension 2 :

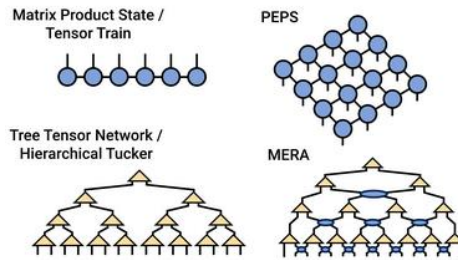


En reprenant le cas du problème à n corps, la contraction de l'information est radicale car en supposant que la taille des dimensions connectées est p , le train de tenseur est représenté par $2 \times p \times ((n - 2) \times p + 2)$ valeurs. On passe donc d'une taille exponentielle à une taille linéaire du nombre de corps dans le système comme illustré ci-dessous avec $p = 2$:



Cette contraction ne se fait pas sans perte d'information. Les opérations de contraction de tenseurs apportent un fondement théorique pour contrôler cette perte.

Autres architectures classiques : si les MPS sont les plus largement utilisés, il existe d'autres architectures étudiées dans la littérature comme les réseaux arborescent (TTN), les *projected entangled pair states* (PEPS) ou les *multi-scale entanglement renormalization ansatz* (MERA). Ces dénominations issues de la mécanique quantique, nous rappellent que l'exploitation opérationnelle des réseaux de tenseurs remonte notamment aux travaux du physicien Steven R. White sur les systèmes quantiques à plusieurs corps (<https://tensornetwork.org/>).



Architectures de réseaux de tenseurs

14.6.1 Quelques usages des réseaux de tenseurs

Représentation fonctionnelle compacte et calcul intégrale en grande dimension :

On s'intéresse ici à des fonctions $f: \vec{x} \in \mathbb{R}^d \mapsto f(\vec{x}) \in \mathbb{R}$ que l'on suppose être des boîtes noires, c'est-à-dire que notre connaissance de f n'ai possible qu'en faisant appel à $f(\vec{x})$ pour autant d'éléments de $\mathbb{R}^d$ que l'on veut. Pour manipuler de telles fonctions il peut être commode de les approximer par des méthodes d'interpolation.

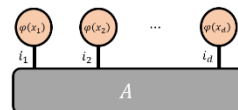
Il existe un grand nombre de méthodes d'interpolation en dimension 1. Pour l'essentielle, elles consistent en la donnée d'une base fonctionnelle (des polynômes, des B-Splines, etc.) composée d'un nombre arbitraire de fonctions $\varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)$ et d'un nombre de $s_1, \dots, s_p$. La fonction $f(x)$ est alors approchée par une fonction $\tilde{f}(x) = \sum_{i=1}^n a_i \times \varphi_i(x)$ où $\vec{a} \in \mathbb{R}^n$ est choisi pour minimiser la somme des écarts entre f et $\tilde{f}$ sur l'ensemble des s_i par une norme quelconque $\|\cdot\|$:

$$\vec{a} = \operatorname{argmin}_{\mathbb{R}^n} \sum_{k=1}^p \|f(s_k) - \tilde{f}(s_k)\|$$

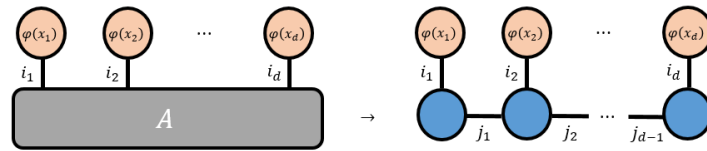
L'extension de cette approche aux dimensions supérieures repose sur le même principe en étendant la base fonctionnelle au produit des fonctions de base utilisée en dimension 1 :

$$\tilde{f}(\vec{x}) = \sum_{i_1, \dots, i_d=1}^n a_{i_1, \dots, i_d} \times \varphi_{i_1}(x_1) \times \dots \times \varphi_{i_d}(x_d)$$

La représentation tensorielle de $\tilde{f}(\vec{x})$ est :



Les réseaux de tenseurs sont candidats pour contourner le démon de la dimensionnalité, par exemple comme illustré sur la figure ci-dessous :



La méthode d'interpolation croisée tensorielle (*tensor cross interpolation*) a pour objet de construire le train de tenseur à partir de la connaissance de f . Elle transforme $\tilde{f}(\vec{x})$ en une version plus compacte $\tilde{f}_c(\vec{x})$.

On remarque que l'intégrale de $\tilde{f}_c(\vec{x})$ est triviale si celles des $\varphi_i(x)$ sont connues.

14.7 CONTRIBUTEURS

Rédacteur

Daniel Vert (Systematic)

Contributeurs

CEA :

Stéphane Louise, Robin Ollive, Christophe Vautey, Francesco Binanti

Crédit Agricole / Crédit Agricole CIB :

Maxime Hardy, Christophe Michel, Andrea Le Vot.

Bull :

Robert Wang, Olivier Hess.

Ampere – Groupe Renault :

Thomas Chapuis, Nassima Benammar, Guillaume Brenaut.

Sanofi :

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

TotalEnergies :

Jean-Patrick Mascomere, Jérémie Messud, Henri Calandra.

Comité de relecture :

Mohammed Bediche – CS groupe – Sopra Steria

Brice Chichereau – CEA

Stéphane Vialle - CentraleSupélec

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.