

Highlight Scientifique

Fiche d'identité

Auteurs : Mahmoud El-Mehdi **EL-KHADIRI**, Jorge M. **CRUZ-DUARTE**, El-Ghazali **TALBI**

Collaboration/Partenaires : INRIA et Université de Lille

Date : 12 Avril 2026

1. Titre accrocheur (1 phrase)

Un algorithme d'optimisation prêt pour l'hybridation Exascale-Quantique à toute échelle - Application de l'algorithme VQE (Variational Quantum Eigensolver) en chimie computationnelle

2. Contexte et objectif

Prédire l'énergie fondamentale d'une molécule constitue un enjeu majeur en chimie computationnelle, avec des applications directes en conception de médicaments, en catalyse et en science des matériaux. Le VQE, une approche hybride combinant calcul quantique et classique, se heurte à deux limitations principales : l'explosion combinatoire du nombre de paramètres et la difficulté des optimiseurs actuels à tirer pleinement parti du calcul Exascale. L'objectif est donc de développer un optimiseur générique, scalable sur des machines hybrides (Exascale-Quantique), et ne nécessitant aucun réglage spécifique à chaque molécule.

3. Résultat clé et nouveauté

L'algorithme développé PFDA-BS, basé sur l'optimisation fractale, a été validé sur le supercalculateur LUMI à partir de neuf molécules couvrant une gamme de 3 à 560 paramètres. Contrairement aux approches existantes, généralement limitées à quelques dizaines d'accélérateurs, il mobilise jusqu'à 8000 GPUs en parallèle, ce qui permet de réduire le temps de calcul de l'ordre d'heures en minutes. Il atteint la précision chimique requise en pratique, sans recourir à aucun calcul de gradient ni à un ajustement des paramètres en fonction de la molécule.

4. Impact et suite (2-3 phrases)

Pour la première fois, un algorithme d'optimisation scalable et générique de type boîte noire peut exploiter pleinement la puissance des supercalculateurs Exascale afin de simuler des molécules présentant un intérêt chimique concret. Fonctionnant uniquement à partir de valeurs d'énergie, il peut également s'adapter sans modification à un calcul hybride avec un ordinateur quantique, ce qui en fait un outil immédiatement opérationnel dès que ce type de matériel sera disponible. L'étape suivante consiste à l'appliquer à des molécules plus complexes, avec des retombées directes en pharmacologie et en science des matériaux, en collaboration avec des partenaires industriels.

De la molécule au résultat



Chiffres clés

