



SEMINAIRE PACK QUANTIQUE

**Organisé par GENCI, LE LAB QUANTIQUE,
SYSTEMATIC et TERATEC**
Avec le soutien de la Région Île-de-France

24 avril 2024
9h30-17h00

EDF LAB PARIS-SACLAY

ACCUEIL

9h30

- **Joseph Mikael et Stéphane Tanguy (EDF)**
- **Daniel Vert, Sabine Mehr, Ylan Tran et Emmanuelle Vergnaud**

AGENDA

9h45-Bilan et retour des différents acteurs

10h05-Pack Quantique dans le domaine des énergies

10h15-Pack Quantique dans la découverte de nouveaux médicaments

10h25-Packs Quantiques dans la mise au point de procédés pour l'industrie

11h00-Packs Quantiques pour l'industrie aéronautique, spatiale et de défense

11h40-Packs Quantiques pour les secteurs banque et assurances

12h10-Projet AQADOC

12h25-Présentation de la plateforme HQI

Le quantique en Région Ile-de-France

- La plus **grande concentration européenne** d'équipes académiques
- Les meilleures **startups au niveau international**
- De **grands groupes industriels**:
 - à la pointe sur ces **technologies**
 - disposant de **cas d'usages** sur lesquels se baser pour démontrer l'avantage quantique

Principe et objectifs des Packs quantiques

Mis en place en **2020** par la Région Ile-de-France pour :

- ❖ Renforcer le leadership de la Région dans l'acquisition de l'avantage quantique
- ❖ Favoriser l'appropriation et le développement du calcul quantique par les acteurs économiques, industriels et startups
- ❖ Principe : Une startup travaille sur un cas d'usage fourni par un industriel
- ❖ Financement de la startup à hauteur de 45 % des frais sur 2 ans
- ❖ Intervention possible d'un académique financé à 100% des coûts additionnels
- ❖ Recherche ouverte
- ❖ Mise à disposition des accès machines fournis par HQI
- ❖ Montée en compétence des industriels et meilleure compréhension de leurs enjeux par les fournisseurs de technologie

13 projets

4M de soutien pour un investissement total de 10M

7 startups franciliennes

3 laboratoires de recherche



13 projets votés à ce jour

<p>2020</p> <p>AQMUSE Quantum Advantage for Multi-Sourcing Energy</p> <p> </p>	<p>2020</p> <p>AQUARE Quantum Advantage to solve complex problems for smart grid Energy</p> <p> </p>	<p>2020</p> <p>AQMED Quantum Advantage for Drug Design</p> <p> </p>
<p>2021</p> <p>ODCAQ Optimization of Atomic layers Deposition using Quantum Computing</p> <p> </p>	<p>2021</p> <p>AQUAPS Quantum Advantage to solve Planning and Scheduling issues</p> <p> </p>	<p>2022</p> <p>AQCMA Quantum Advantage for Engine Combustion</p> <p> </p>
<p>2022</p> <p>AQUAEDP Quantum Advantage to solve Partial Differential Equations</p> <p> </p>	<p>2022</p> <p>QMLCat Quantum Machine Learning using Cat Qubits</p> <p> </p>	<p>2022</p> <p>AQGeTAD Quantum Advantage for Urban Drone Traffic Optimization</p> <p> </p>
<p>2023</p> <p>AQACYB Quantum Advantage for CYBerthreat Analysis</p> <p> </p>	<p>2023</p> <p>AQADEF Quantum Advantage for Fraud Detection</p> <p> </p>	<p>2023</p> <p>GAUPRO Risk Assessment of Derivative Portfolios using Quantum Regression of GAUSSian PROCesses</p> <p> </p>
<p>NEW 2024</p> <p>AQADOC Distributed quantum algorithms for energy production</p> <p> </p>		

Pack Quantique Île-de-France :

Bilan des 4 années

Kenzo Bounegta, (Le Lab Quantique)

SEMINAIRE PACK QUANTIQUE

Retours des questionnaires

**Kenzo Bounegta, Secrétaire Général Le Lab
Quantique**

EDF LAB PARIS-SACLAY

Séminaire Pack Quantique- 24
avril 2024



Objectifs de cette présentation

01.

Vous présenter les retours des bénéficiaires du Pack Quantique

02.

Analyser la criticité du dispositif dans la construction de l'écosystème quantique francilien

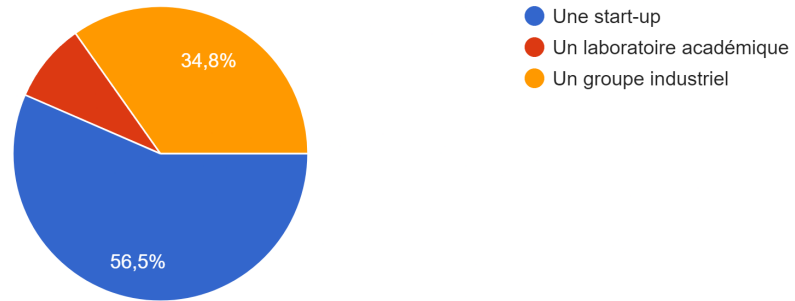
03.

Co-construire la suite avec vous



Profils des répondants

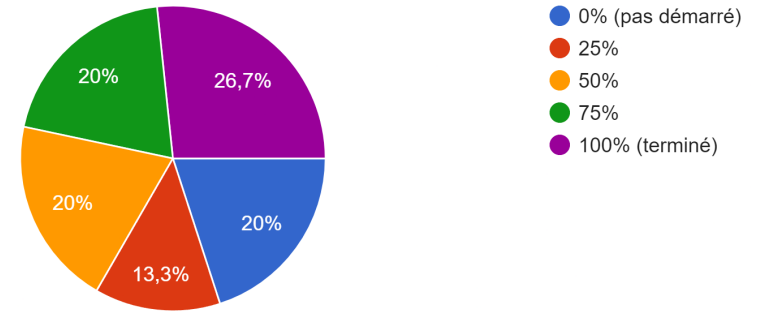
Une majorité de startups



23

Répondants

Un continuum d'états d'avancement

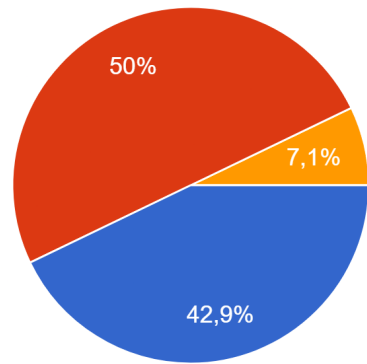


1/3

Ayant donné lieu à des publications scientifiques

Etat des lieux avant le Pack : pour les startups

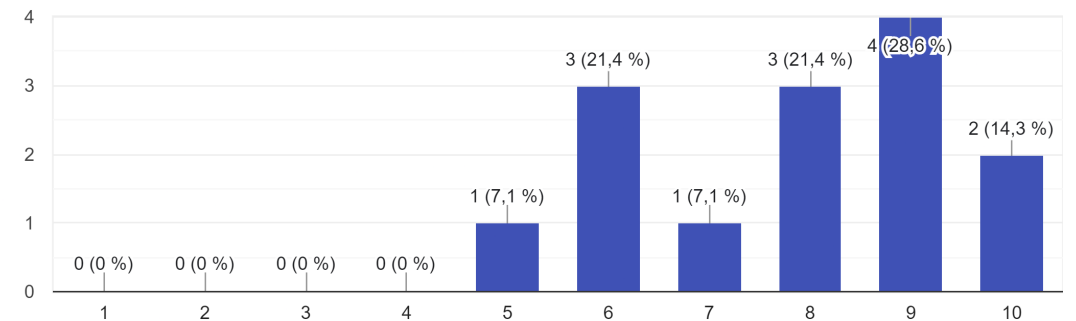
Importance perçue du calcul quantique par l'industriel



- Critique, il était déjà convaincu
- Relative, cela nécessitait un travail de sensibilisation
- Faible, il y attribuait peu de crédibilité

Une nécessaire sensibilisation à leurs enjeux propres

Au début du PaQ, mon partenaire industriel comprend mes contraintes opérationnelles (levées de fonds, structuration, etc).



Etat des lieux avant le Pack : pour les industriels

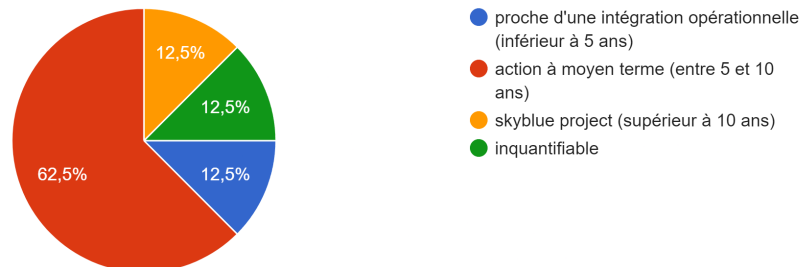
38%

Des industriels n'avaient pas de permanent dédié au calcul quantique

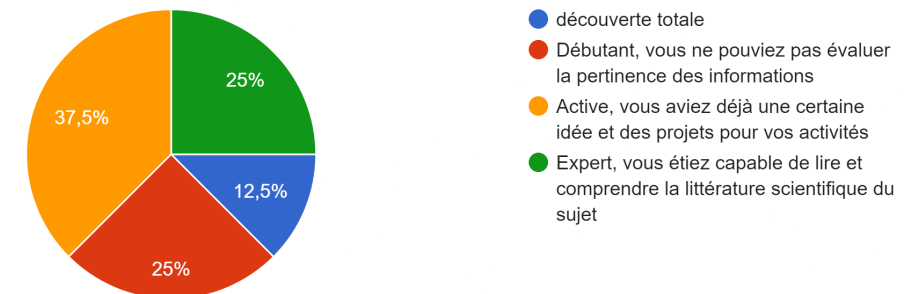
Le calcul quantique était envisagé à moyen ou long termes

Avant le PaQ, comment estimiez vous la maturité du calcul quantique pour l'industrie ?

8 réponses

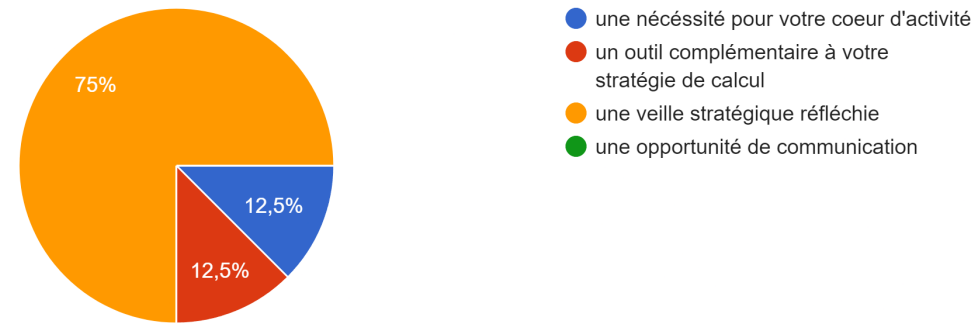


...mais faisait déjà l'objet d'une expertise interne



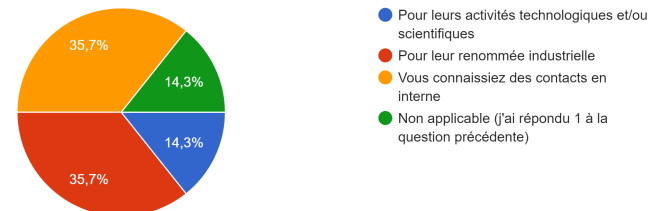
Un outil de sensibilisation

Le calcul quantique était avant tout perçu comme un sujet de veille stratégique par les industriels



Une mise en avant de l'expertise scientifique

Si vous avez répondu 2 (Le PaQ a été co-construit) ou 3 (Vous êtes à l'initiative du PaQ) à la question précédente, pourquoi avez-vous accepté de travailler avec le partenaire industriel?
14 réponses



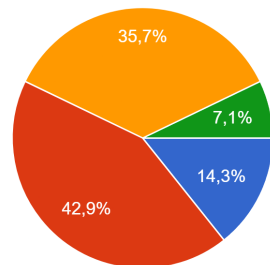
Un outil de création de partenariats et synergies

58%

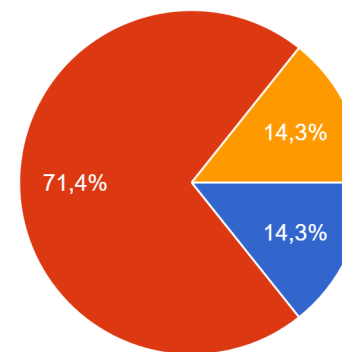
Des projets n'auraient pas été envisageables sans les Pack

Pour les startups, une réelle valeur scientifique perçue Les projets ont souvent été co-construits

Avant le PaQ, selon vous, que représentait la collaboration avec votre société pour l'industriel?



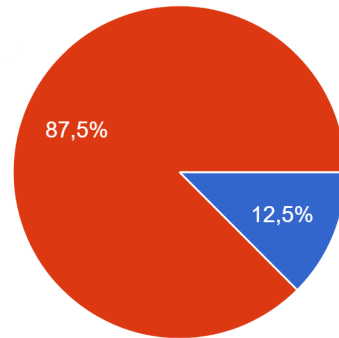
- Une nécessité pour son coeur d'activité
- Un outil complémentaire à sa stratégie de calcul
- Une veille stratégique réfléchie
- Une opportunité de communication



- Le PaQ vous a été proposé
- Le PaQ a été co-construit
- Vous êtes à l'initiative du PaQ

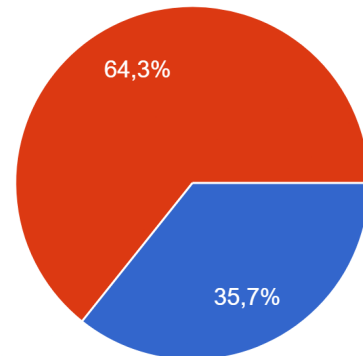
Etat des lieux après le Pack

Une volonté de continuer le travail collaboratif (volonté d'entamer un projet plus avancé)



- Oui, c'est une priorité identifiée
- Oui, mais avec le soutien de l'écosystème
- None, le calcul quantique ne correspond pas ou plus à votre stratégie

Un outil qui remplit des objectifs de création d'ETP



- Stable (continuité de la veille stratégique)
- Renforcée (recrutement ETP ou attribution d'un pourcentage ETP)

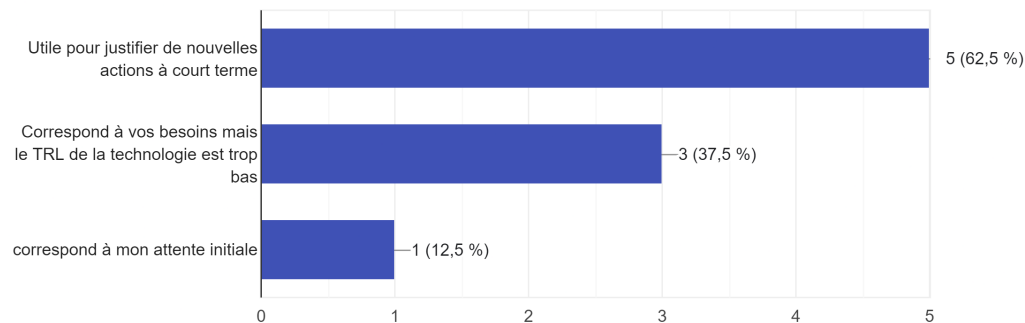
Un double apprentissage

2/3

Des répondants estiment avoir trouvé une voie de développement

Une meilleure compréhension de la maturité

Quel est le poids des résultats du Pack sur votre engagement futur dans le calcul quantique ?

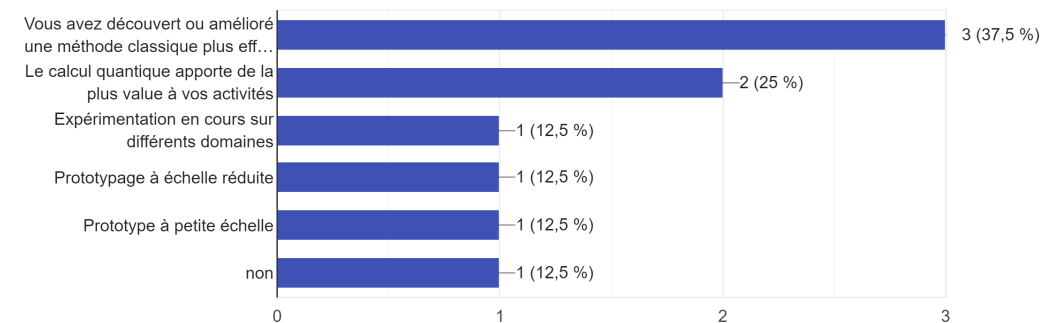


1/3

Des répondants estiment que le Pack a permis d'exclure des voies de développement technologique

Des niveaux d'avancement hétérogènes

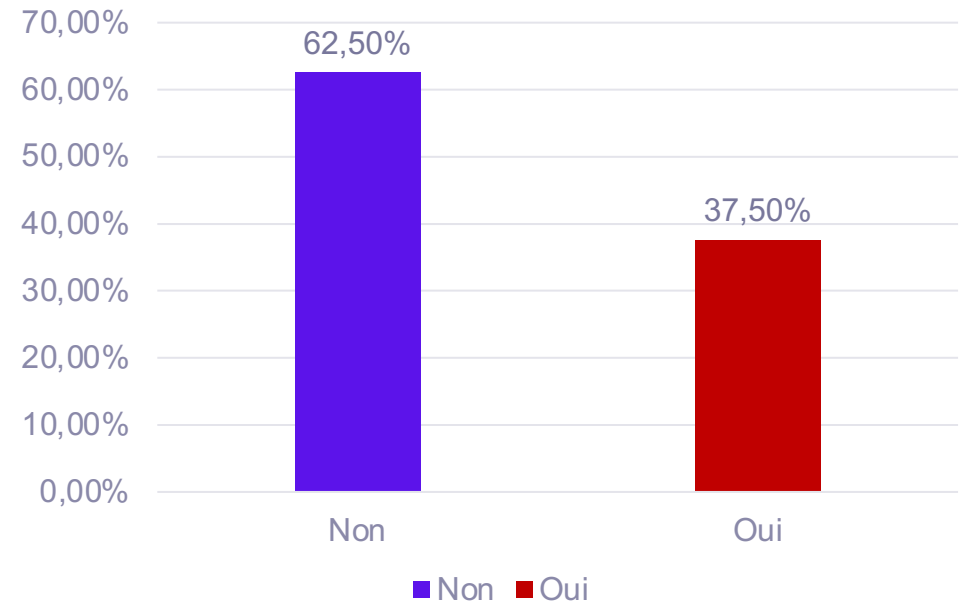
Le Pack vous a-t-il permis de repenser vos solutions actuelles :



Construction d'un écosystème quantique francilien fort

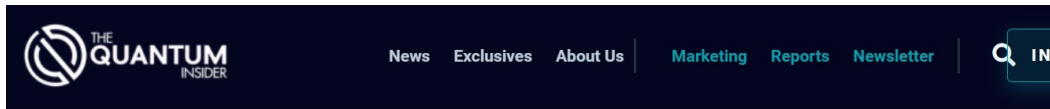
86%

Des répondants estiment que le Pack a été une **motivation** pour leur **développement** en **Ile-de-France**



Sans le mécanisme du Pack quantique Ile-de-France, auriez-vous engagé un projet avec cette start-up en particulier ?

Construction d'un écosystème quantique francilien fort



Pack Quantique, Ile-De-France Fund Projects To Explore Quantum Advantage In Aeronautics, Space And Defence

Quantum Computing Business | Matt Swayne • October 4, 2022



Une couverture médiatique accrue



Une sensibilisation et un appui politiques



Des voies de croissance pour le dispositif : accompagner le passage à l'échelle

Quelle inclusion des industriels dans le financement ?

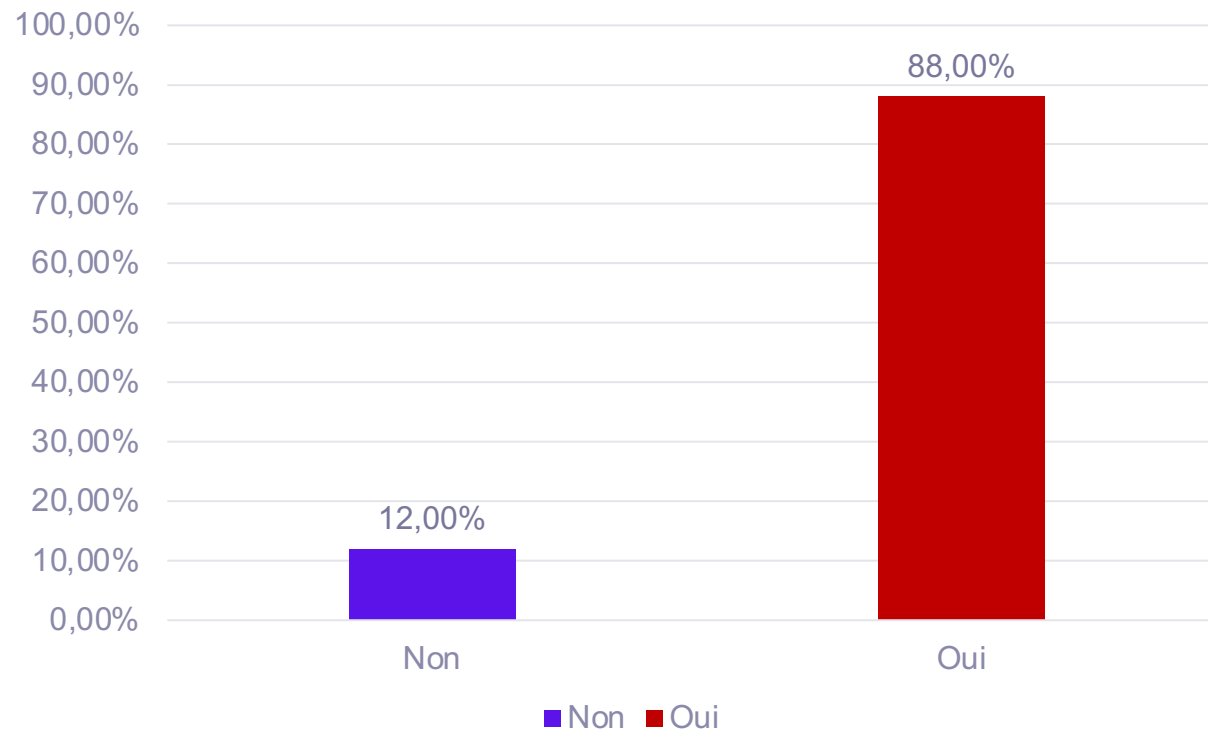
Nécessité d'envisager une suite pour continuer à mûrir le cas d'usage. Nécessité d'un budget pour l'industriel pour le passage de connaissance

Quelles formules pour la suite ?

Il est nécessaire de prévoir des processus "PACK MATURATION"

Une extension de la formule à l'échelle nationale ou européenne ?

Discutons cet après-midi !



Souhaitez-vous travailler avec une autre start-up dans le but de tester une autre technologie ou plateforme ?



SÉMINAIRE PACK QUANTIQUES



AQUARE

Pascale
BENDOTTI

Krisztian
BENYO

Joseph
MIKAEL

AQUARE : L'histoire accélérée

2020 Début de l'histoire par l'entremise de Atos et grâce au déclenchement de la région

Panier côté EDF

40 d'expertise sur le développement de méthodes numériques industrielles

Des idées sur l'utilisation de solvers MIS à l'industrie

Une volonté de se rapprocher du hardware

Actif côté Pasqal / IOGS

40 ans d'expertise de l'IOGS sur les technologies quantiques

Une machine de laboratoire et pas de machines prototype

Une volonté de se rapprocher d'un industriel qui sait parler aux chercheurs

MATCH!

Sentiment dans la communauté :
optimisme
exacerbé/pessimisme
acerbe

Will Quantum Computing Change the World?

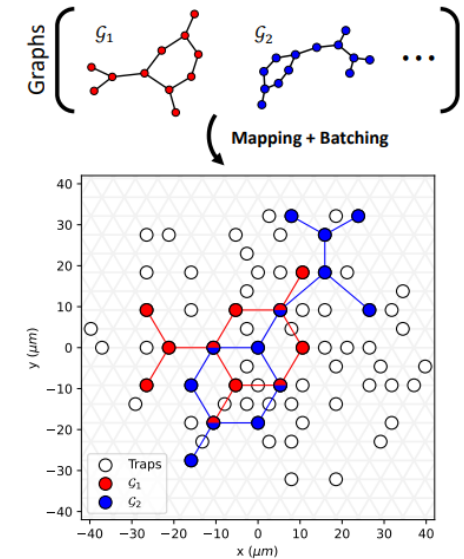
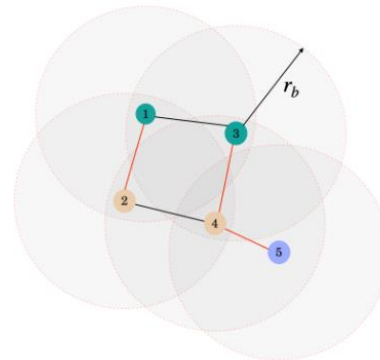
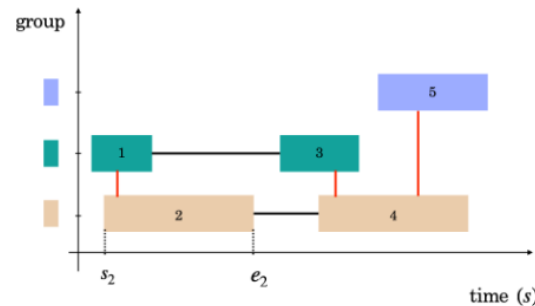
Fairview Capital · Follow
Published in Fairview Capital · 9 min read · May 5, 2020

Quantum computing: Opening new realms of possibilities

J|y Tom Garlinghouse for the Office of the Dean for Research on Jan. 21, 2020, 7:40 a.m.

AQUARE : L'histoire accélérée

- 2020 Début de l'histoire par l'entremise de Atos et grâce au déclenchement de la région
- 2021 2022 Définition d'un encodage d'un problème d'optimisation industriel sur la machine Pasqal



AQUARE : L'histoire accélérée

- 2020 Début de l'histoire par l'entremise de Atos et grâce au déclenchement de la région
- 2021 2022 Définition d'un encodage d'un problème d'optimisation industriel sur la machine Pasqal
- 2022 -2023 : Diversification dans nos actions, nos partenariats

Côté EDF

Développement de méthodes systématiques d'encodage de problèmes industriels sur machines analogiques

Développement de partenariats avec d'autres startups (Quandela, A&B)

Côté Pasqal / IOGS

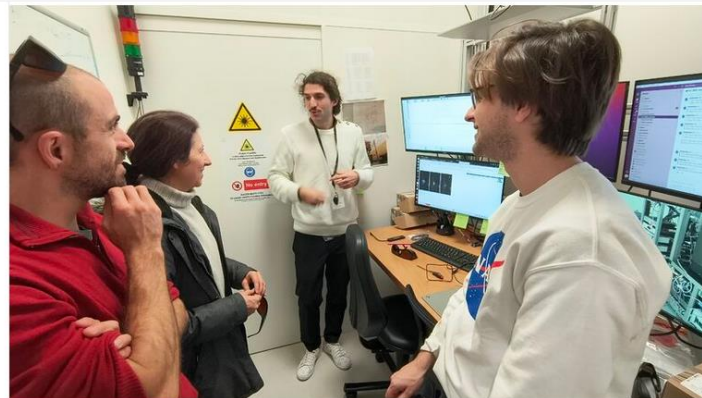
Développement de partenariats avec d'autres industriels

Développement de machines

AQUARE : L'histoire accélérée

- 2020 Début de l'histoire par l'entremise de Atos et grâce au déclenchement de la région
- 2021 2022 Définition d'un encodage d'un problème d'optimisation industriel sur la machine Pasqal
- 2022 -2023 : Diversification dans nos actions, nos partenariats

● 2024 l'XP



👤 Olivier Feron and 167 others · 17 comments · 8 reposts

👍 Like 💬 Comment 🔄 Repost ➦ Send

📊 12,136 impressions

[View analytics](#)

AQUARE : L'histoire accélérée

Actif EDF

20

Agents impliqués à temps partiel

5

partenariats ac fabricants français

➤ 20 papiers de recherche en quantique

➤ + 5 à prévoir dans les 6 mois

Actif côté Pasqal

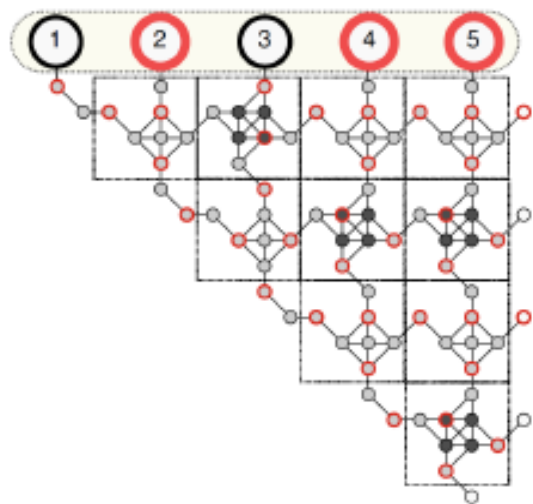
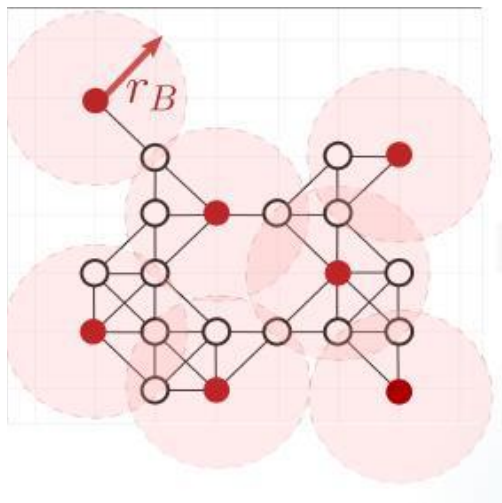
30+
clients

350+
qubits

30+
patents &
applications
800+
publications

250+
employees
19 nationalities, present
in 8 countries

Full-Stack
quantum
hardware and
software today
Practical quantum
advantage in 2024

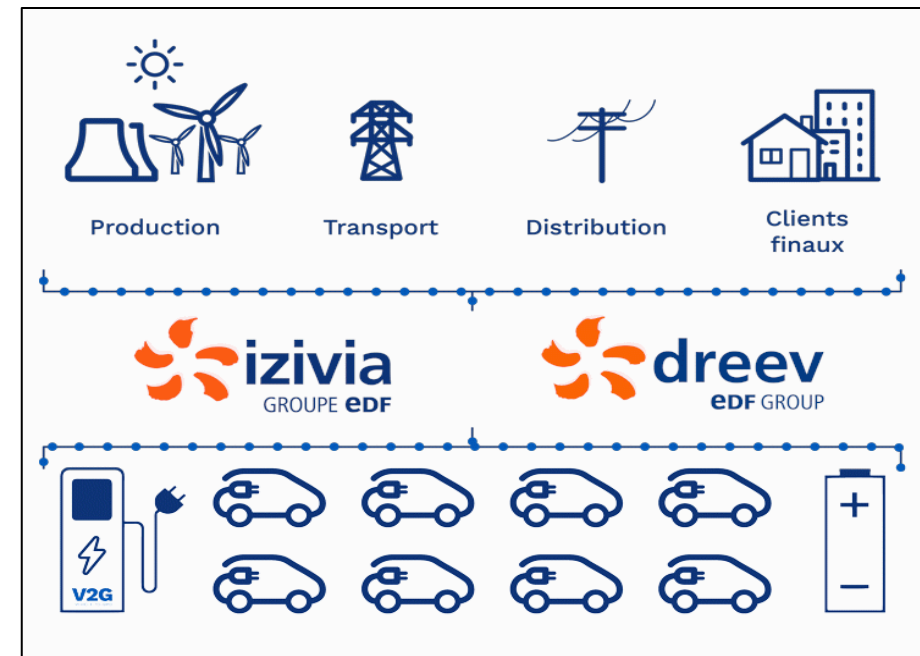


AQARE en détail

Problématique EDF

Smart Charging pour le routage de véhicules électriques vers les bornes les moins occupées

- avec des règles de priorité
- *Smart charging* optimal pour optimisation d'un grand nombre de charges/décharges de véhicules électriques pour contribuer à la stabilité de la fréquence du réseau
 - **V2G_FCR** (Frequency Containment Reserve)



Optimisation du temps de chargement

Minimisation du temps de charge totale pondérée

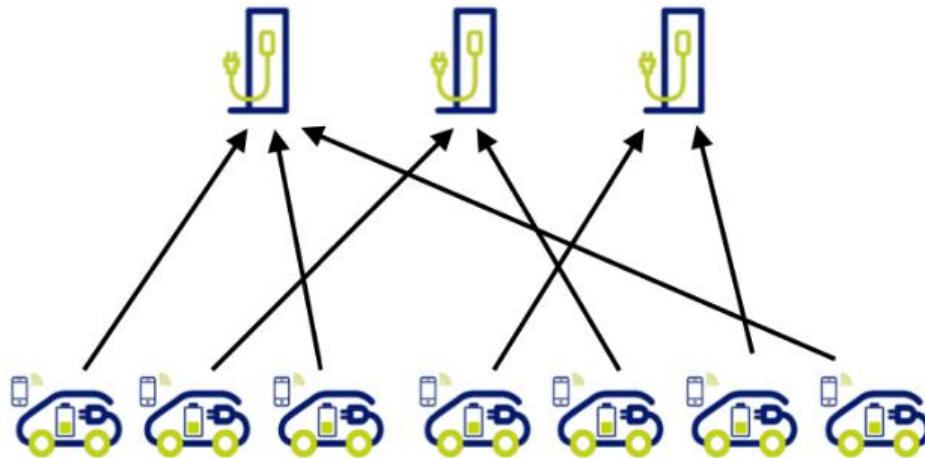
On dispose d'un ensemble de n tâches de charge, chacune avec une durée t_i spécifique, ainsi qu'une priorité

On nous donne également un ensemble de k points de charge

En indiquant le temps d'achèvement de l'emploi i avec C_i , l'objectif est de minimiser le temps total pondéré d'achèvement

$$\min \sum_{i \in I} w_i \cdot C_i$$

Problème classique d'ordonnancement pondéré

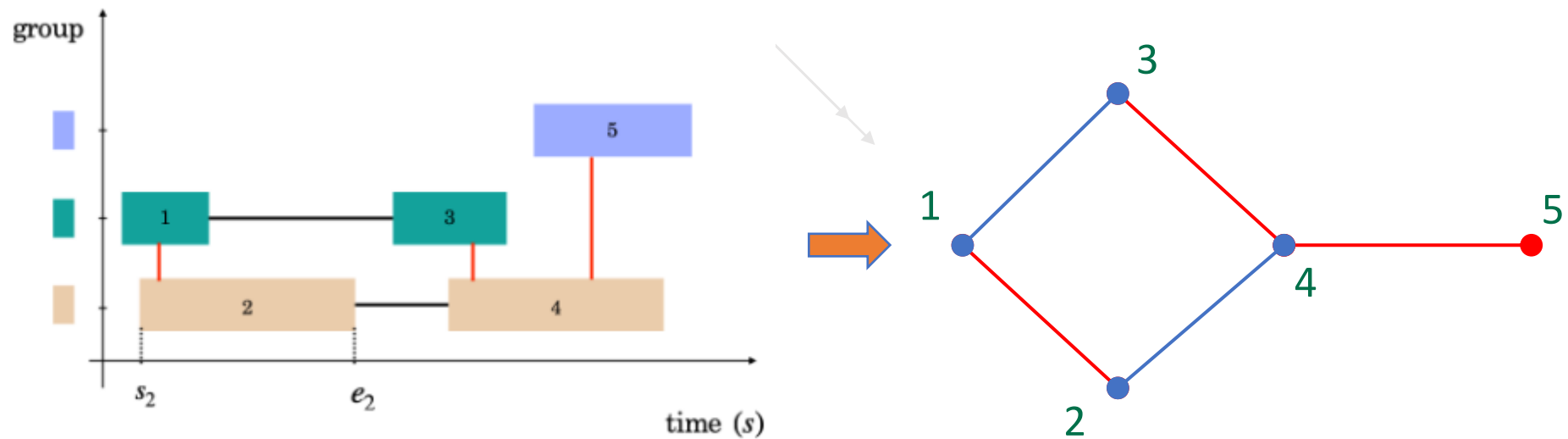


Du problème de recharge à un problème de graphe PASQAL

On peut traduire le problème de *smart charging* sous la forme d'un graphe de contraintes :
Les sommets correspondent à chaque intervalle du problème (chaque tâche de chargement)

Une arête est tracée entre deux sommets si :

1. Les intervalles correspondants se chevauchent dans le temps
2. Les intervalles correspondants appartiennent au même groupe



L'objectif est de trouver un ensemble indépendant maximal dans le graphe, correspondant à une solution optimale réalisable au problème d'ordonnancement des intervalles de groupe

Unit-Disk Graphs et le problème Maximum Independent Set

On considère un cas special de graphes

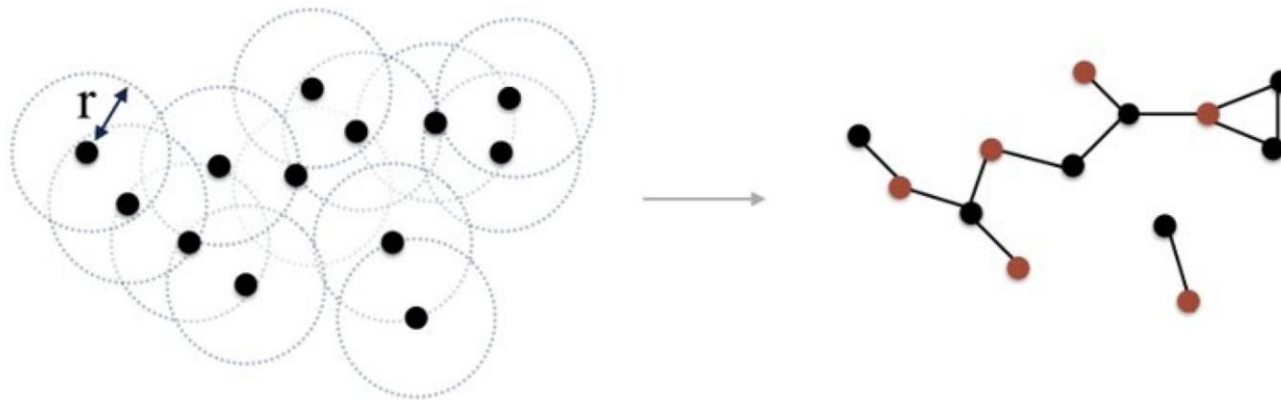
Un graphe Unit Disk (UD) est un graphe qui peut être plongé dans le plan euclidien 2D s.c.
Deux sommets sont reliés par une arête s'ils sont séparés par une distance inférieure à un rayon unitaire r .

Pour les graphes UD, l'encodage à l'aide d'atomes de Rydberg est natif et sans surcharge :
Chaque sommet peut être représenté par un atome et la connectivité matérielle est en correspondance 1-à-1 avec la connectivité UD.

Un ensemble indépendant (IS) est un sous-ensemble de sommets dans le graphe G tel qu'il n'y a pas deux sommets adjacents.

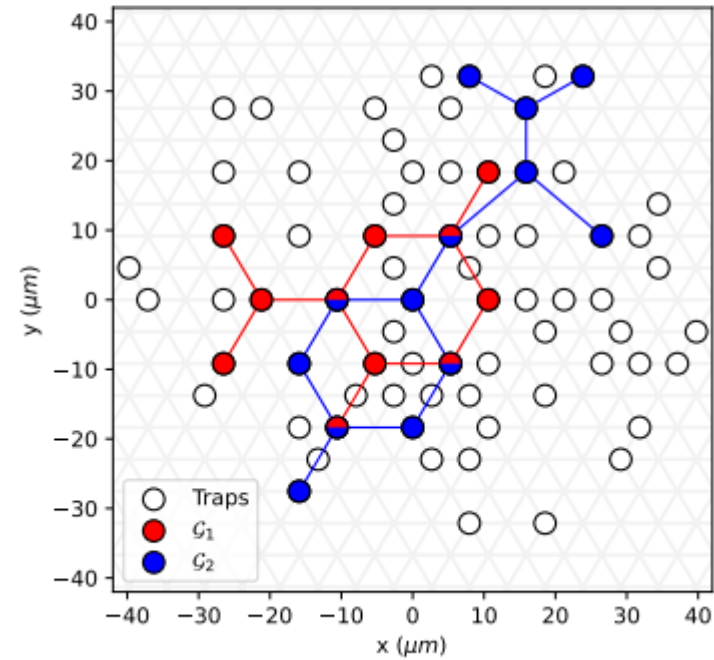
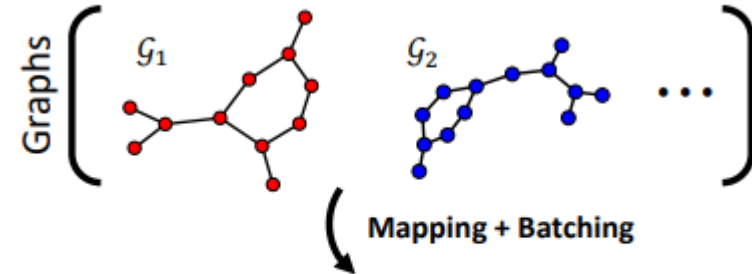
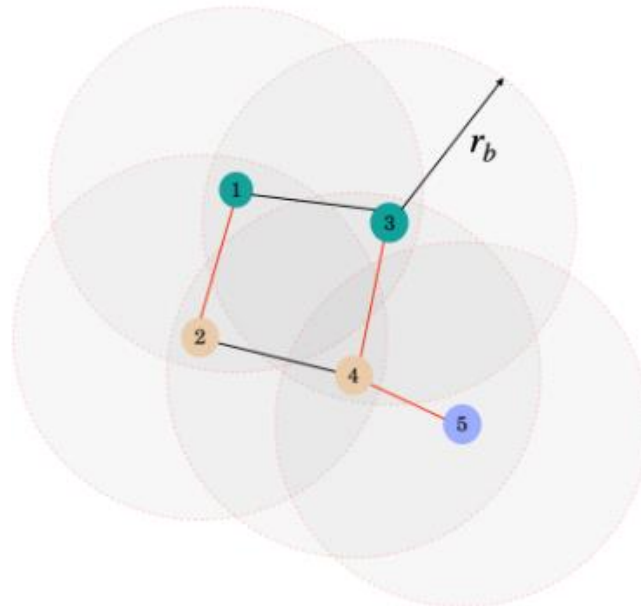
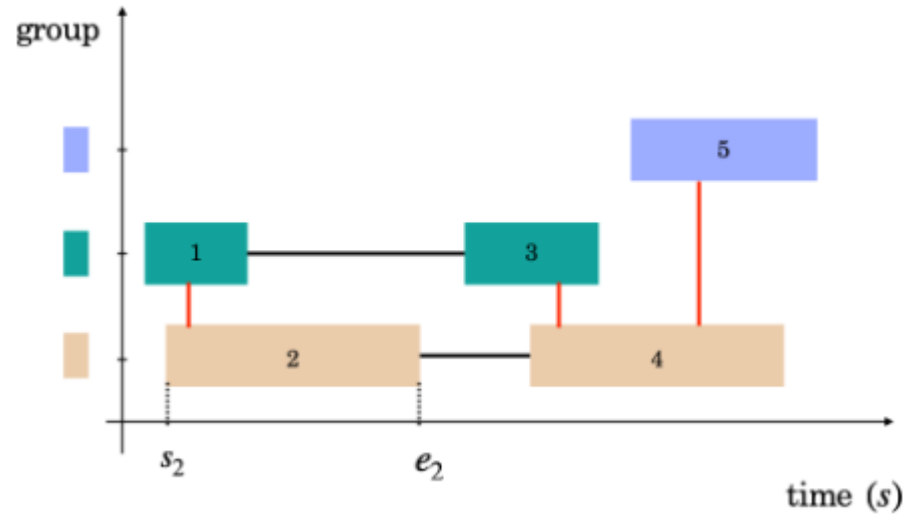
Le problème de Maxi Independent Set consiste à trouver un IS de cardinalité maximale.

Problème NP hard



Implementation

Encodage du graphe de problèmes en tant que graphe Unit Disk pour la mise en œuvre de la machine



Résultats expérimentaux

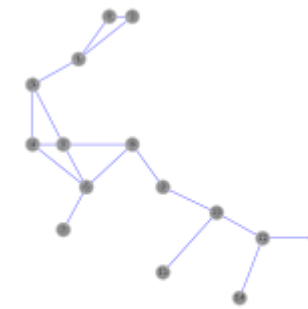
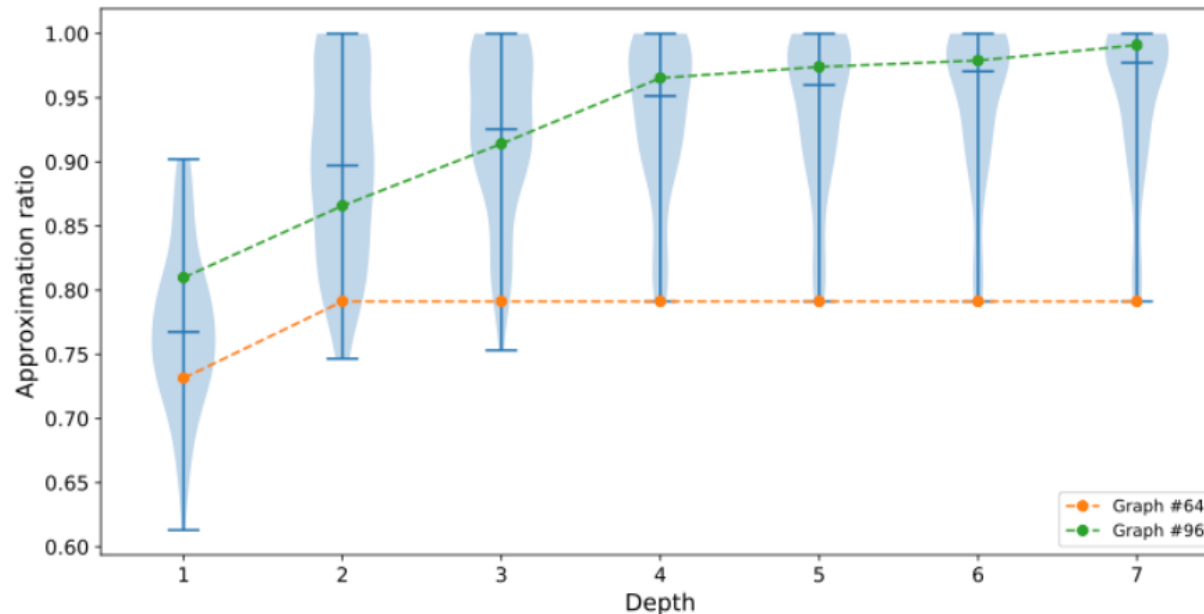
84 graphiques extraits de 2250 chargements du réseau Parisien Belib1

L'algorithme adiabatique quantique a été déployé pour les essais

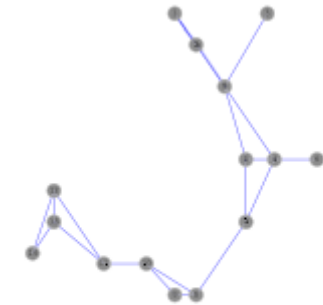
Un algorithme hybride variationnel (quantique-classique) pour les problèmes combinatoires

Jusqu'à 7 architectures de couches étudiées. Les graphiques du pire scénario nécessitent une analyse plus approfondie.

Optimisation de l'œuf appliquée avec évolution différentielle pour éviter les minima locaux.

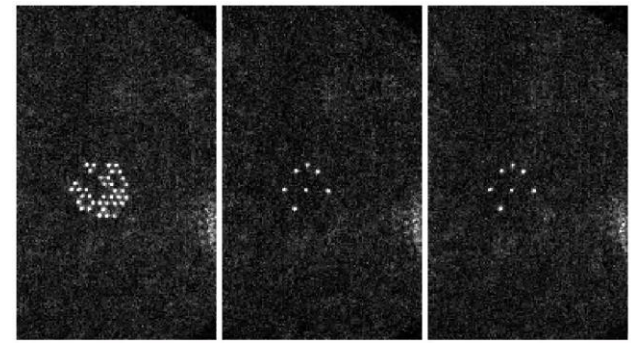


(b) Graph #96.



(c) Graph #64.

Résultats : Mise en œuvre machine

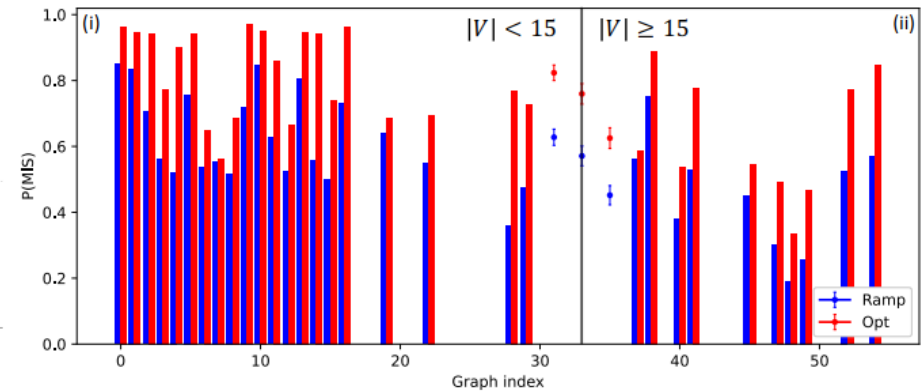
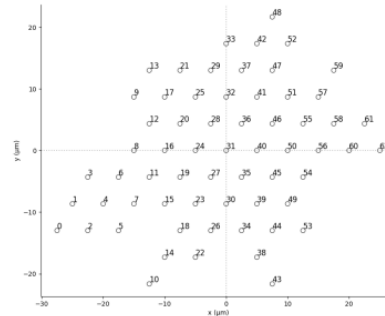
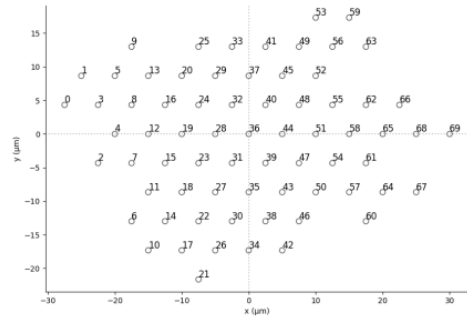


33 graphes extraits de la base de données (tailles 9 à 23 nœuds)

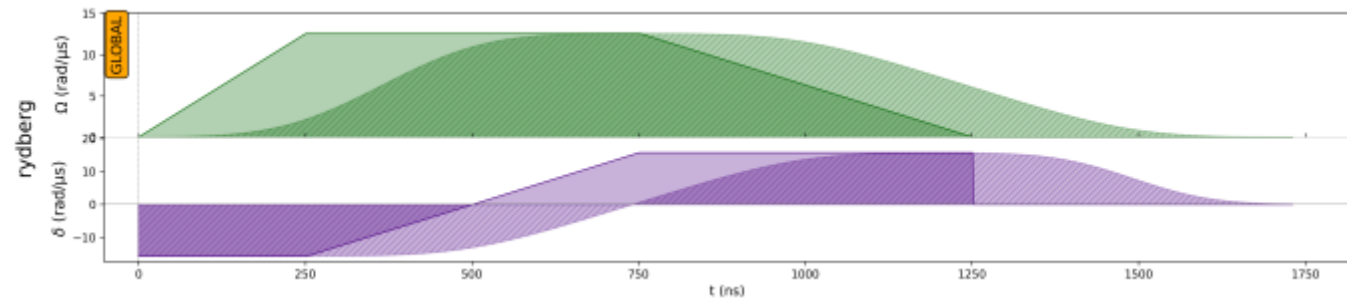
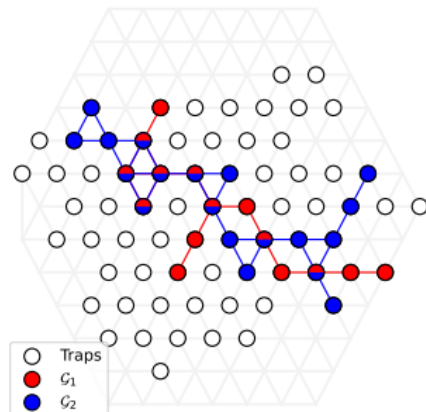
L'algorithme adiabatique quantique est choisi :

Une approche en rampe pour faire évoluer les deux paramètres d'impulsion laser

Les impulsions initiales et optimisées montrent de bonnes probabilités de trouver la solution avec seulement 15 à 30 exécutions de machines.



(b) Layout 1



Conclusions on AQARE



Deux problèmes stylisés ont été étudiés dans le domaine de la recharge intelligente des véhicules électriques dans le cadre de cette collaboration entre EDF et Pasqal

Des implémentations quantiques efficaces sur le plan matériel ont été proposées, étudiées et mises en œuvre sur un ensemble de données réelles sur la recharge des véhicules électriques (sur 2250 instances).

Les algorithmes quantiques obtiennent un taux d'approximation élevé (>98 %) de manière cohérente

Les premiers résultats sont comparables aux schémas d'approximation classiques, même à ce stade précoce

La mise en œuvre matérielle confirme les taux de précision prévus grâce à des simulations

Des approches hybrides (quantiques-classiques) plus efficaces sont en ligne pour les tests, ce qui promet un gain de performance réel par rapport aux meilleures méthodes d'approximation classiques de leur catégorie.

La prochaine génération de QPU de Pasqal comprenant jusqu'à 1000 qubits, qui sortira en 2024, éliminera la principale contrainte des implémentations actuelles.

Perspectives

Côté EDF

Un des industriels les plus impliqués dans le monde sur la thématique

Plusieurs actions avec la plupart des startups hardware d'IdF

Etude de l'encodage systématique de pb sous forme MIS UD

Côté Pasqal

Le domaine d'énergie a été identifié comme un domaine industriel stratégique

Des collaborations renouvelées avec des nouvelles synergies

Les expériences ont permis de débloqué plusieurs axes en recherche opérationnelle



Journée PACK Quantique

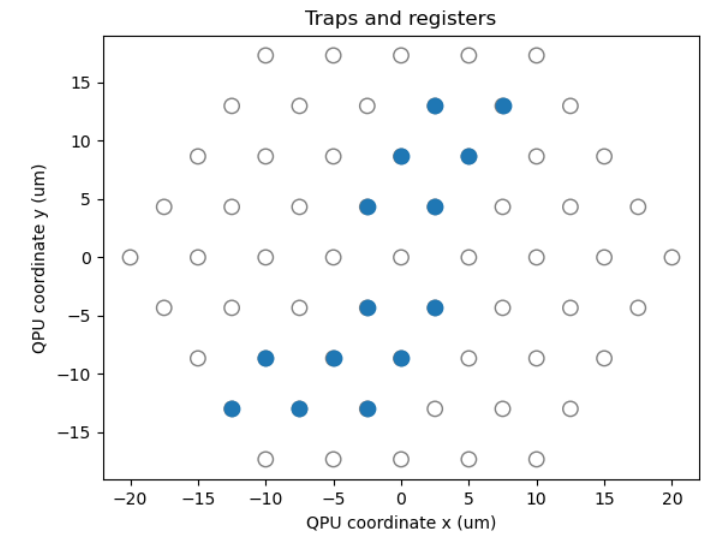
Projet ACQMED

Le projet ACQMED



Des messages clés

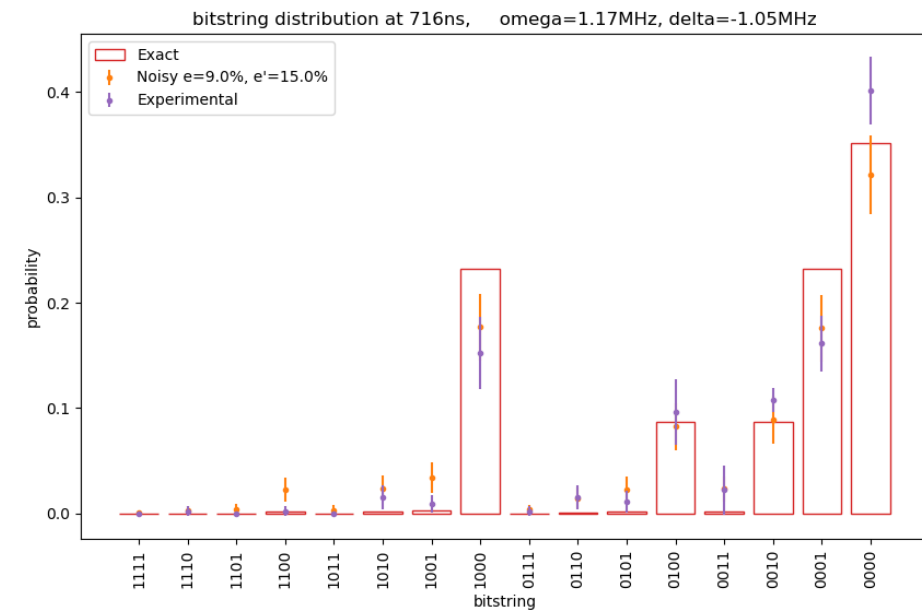
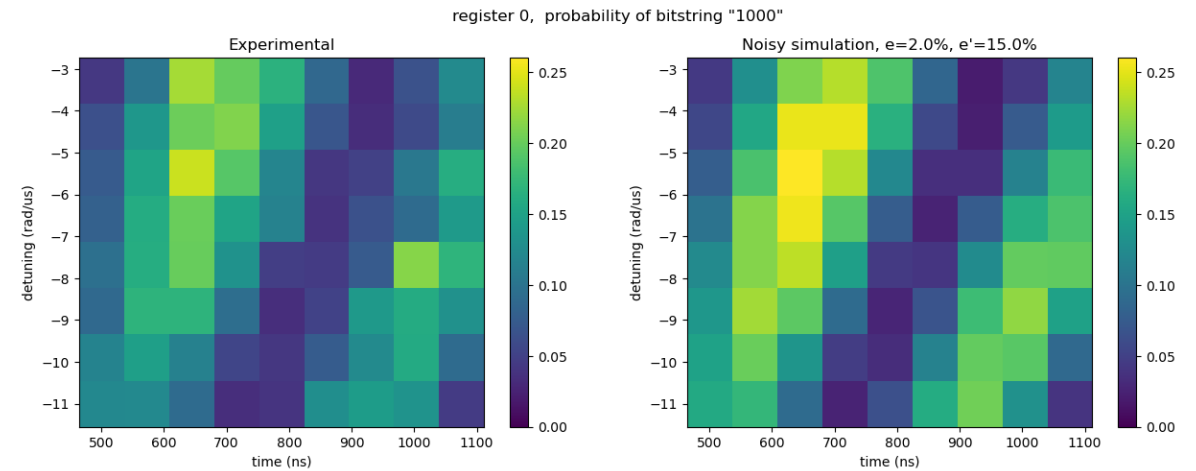
- On a développé un cadre quantique – classique pour résoudre le problème d'hydratation des protéines
 - Le composant classique est un algorithme existant connu, appelé 3D-RISM
 - Le composant quantique est un algorithme innovateur pour des modèles de mélange des Gaussiennes [brevet déposé]
- La solution se repose sur le calcul quantique analogue
- La solution développée est résistante aux bruits et peut être implémentée sur des ordinateurs quantiques existants
- Une implémentation sur le QPU a été effectuée l'année dernière dans un cadre simplifié sur la machine Pasqal



Exemple de registre de qubits sur le QPU

Des messages clés

- Les résultats des expériences (violet) étaient en accord avec des résultats théoriques (orange), sous la marge d'erreur du QPU, ce qui confirme une faisabilité à courte terme



C12

Quantum chemistry
C12 x Quantinuum x Air
Liquide

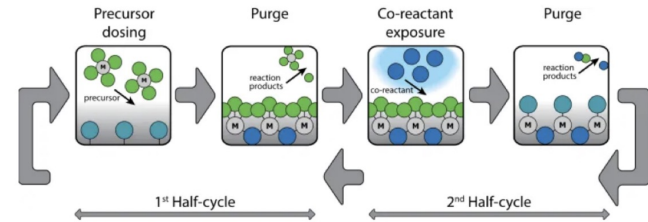
Pierre Desjardins, *Chief Executive Officer & Co-
Founder*

New chemical reactions is key to answer the **rapidly evolving needs of the semiconductor industry**

Bottom-up nanofabrication by **atomic layer deposition (ALD)** on precise surfaces (process selectivity) currently gaining momentum

Novel semiconductor nodes progressively requiring **more specific reagents** and an **ever-increasing range of materials**

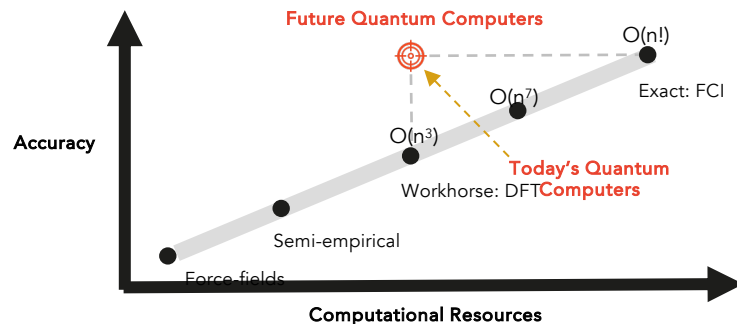
Need to develop **selective and stable organometallic precursors**



Current computing solutions do not make it possible to answer these new customer needs

Barriers reactions and stability of transition states **not correctly estimated** by DFT

Challenge of simulating accurately **strongly correlated** molecules, materials and processes due to the **rapid scaling of computational resources** with respect to the number of electrons involved



Source: Quantinuum

We started an innovative partnerships to explore how quantum computing supports on a industry-relevant use case



Use case

*World class expertise in
quantum chemistry*



Quantum hardware

*Next-generation
quantum computing
technology*



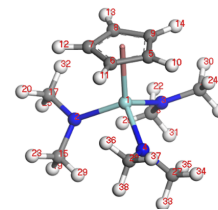
QUANTINUUM

Quantum software

*World leader in quantum
algorithms for quantum
chemistry*

Zr precursor for ZrO_2 , proposed by Air Liquide

Zirconium amido cyclopentadienyl complex $[CpZr(N(CH_3)_2)_3]$



We are building
a carbon
nanotube based
quantum
computer

1-2 nm

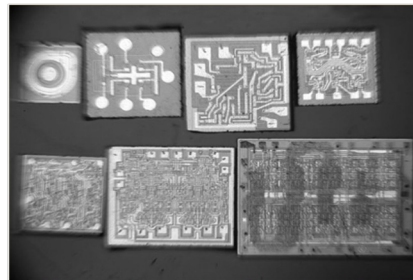
0.2-5 μm

Carbon nanotubes will be what **silicon** was for classical transistors: the **enabling material**

Classical computing

[From 1960s]

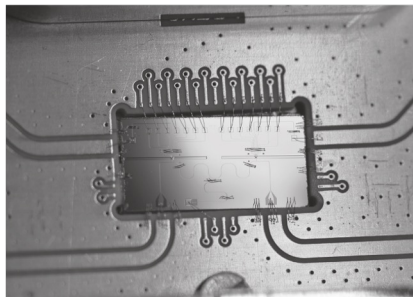
Silicon



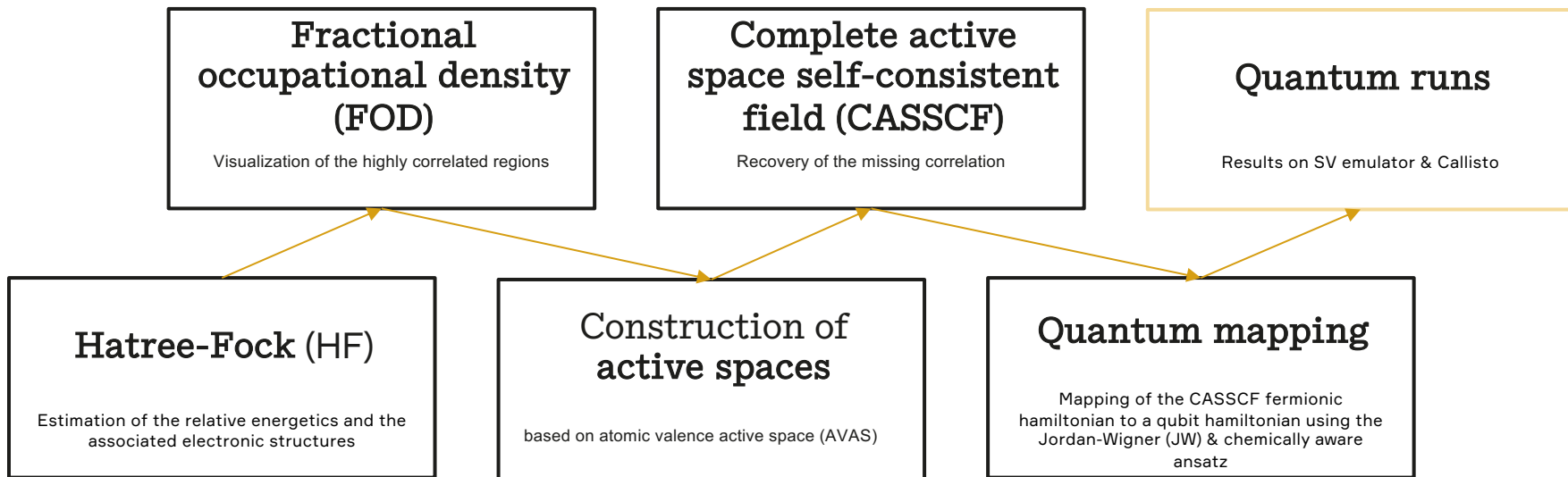
Quantum computing

[From 2020s]

Carbon nanotubes

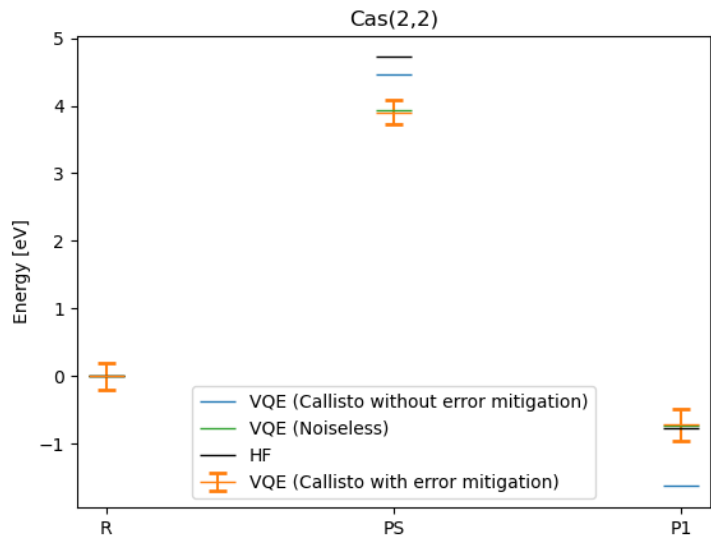


We built a unique hybrid quantum/classical workflow on a specific problem

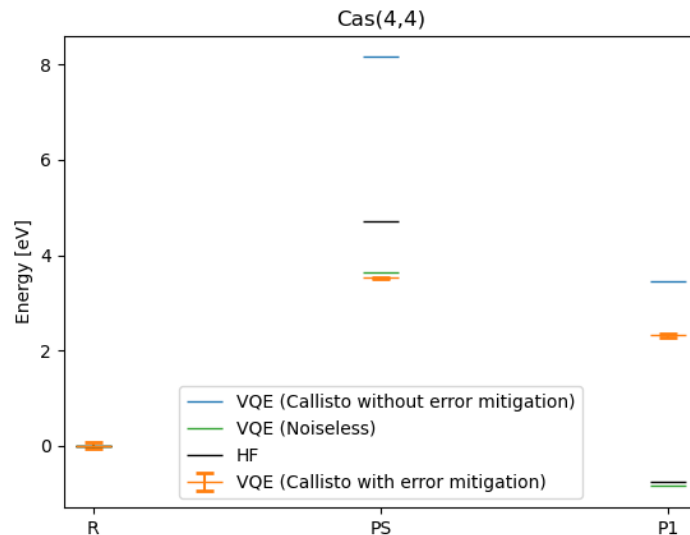


When running on Callisto, the error is at chemical accuracy for CAS(2,2) and c. 90 mHartree for CAS(4,4)

Relative energies of TS and P1 states



Relative energies of TS and P1 states



Main achievements & take-aways

Construction of models for the three states of the reaction

Interface of Callisto with `TKET` and `InQuanto`

VQE simulations using a statevector simulator as well as Callisto

It is **possible** to simulate a reduced version of an industry-relevant problem on a (even noisy) quantum computer

The tested algorithm (VQE) **cannot be scaled**

C12

Leading the next materials leap in quantum computing

hello@c12qe.com

Journée Pack Quantique

Projet AQUAPS

Mission planning for satellites

Quantum computing
for earth observation



Mission Planning for a constellation of satellites

Problem Introduction

A constellation of satellites with defined trajectories

A set of missions to execute:
pictures of specific cities to be taken

Goal

Maximize the number of missions accomplished in a day

■ Mission unaccomplished

■ Mission unaccessible

■ Mission accomplished

{OPEN}

Problem Constrains



Optical satellite can only operate at day-time



Avoiding cloud coverage



Recharge batteries by orienting satellites panels towards sun



Dump observation data to ground stations (limited memory)



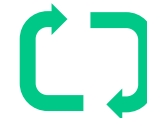
Maintain high resolution image



Limited speed to avoid vibration



Favor missions with high priority



Flexibility: change mission plan during day

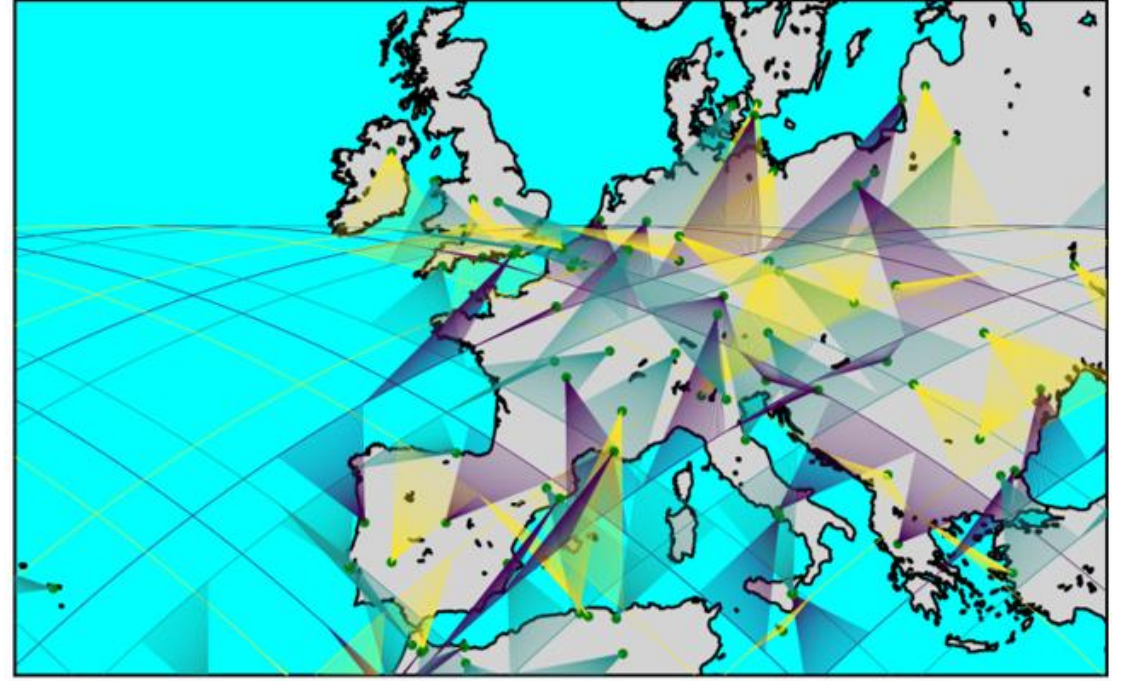
Extending the problem to multiple satellites requires better performing solutions

Results

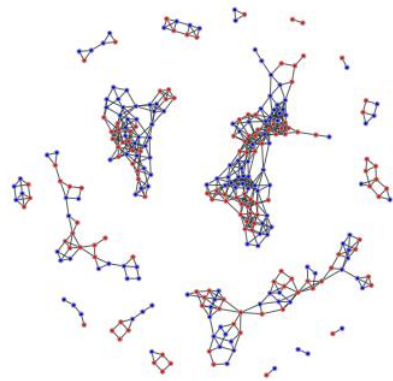
1 satellite



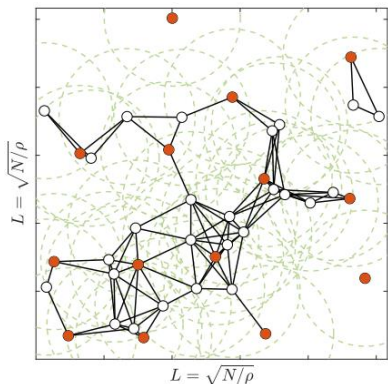
3 satellites



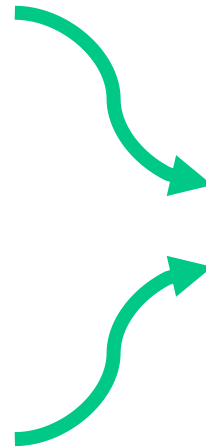
We combined different approaches to a methodology that can benefit from the use of PASQAL QPUs



A maximum independent set method for scheduling earth observing satellite constellations, 2021, D. Eddy et al.



Quantum optimization of maximum independent set using rydberg atom arrays, 2022, S. Ebadi et al.



Our quantum solution is based on the application of the MIS problem in a graph encoding the problem of relevance

MIS Approach

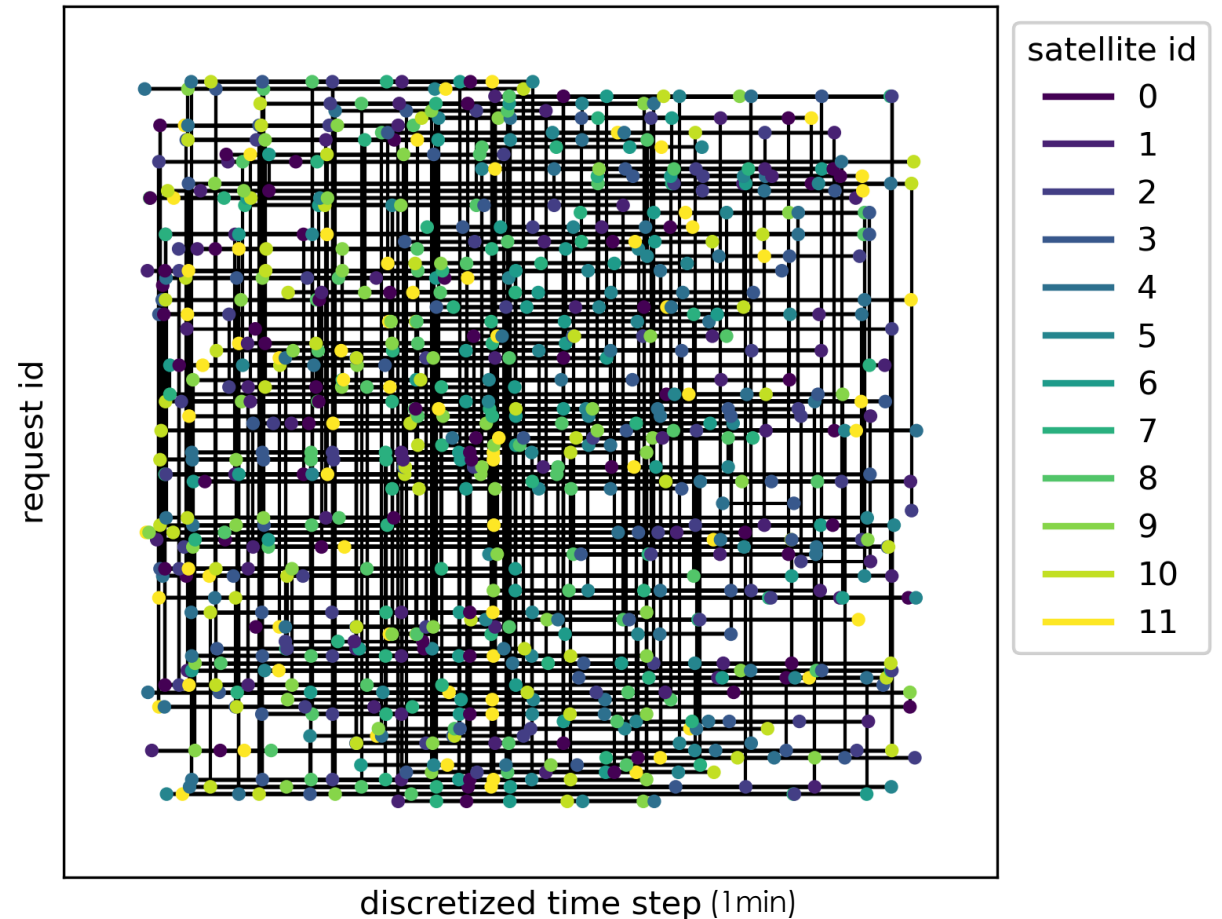
Encoding the problem in a Graph Structure

Graph Construction

- Nodes are equivalent to mission slots
- Colors represent unique satellites of the constellation
- Edges are equivalent to incompatibilities of constraints
 1. Only one request per satellite slot
 2. No overlapping time slots per satellite

400 nodes

Visiting capitals with 12 shifted ISS



Acquiring Solutions within the Encoded Graph

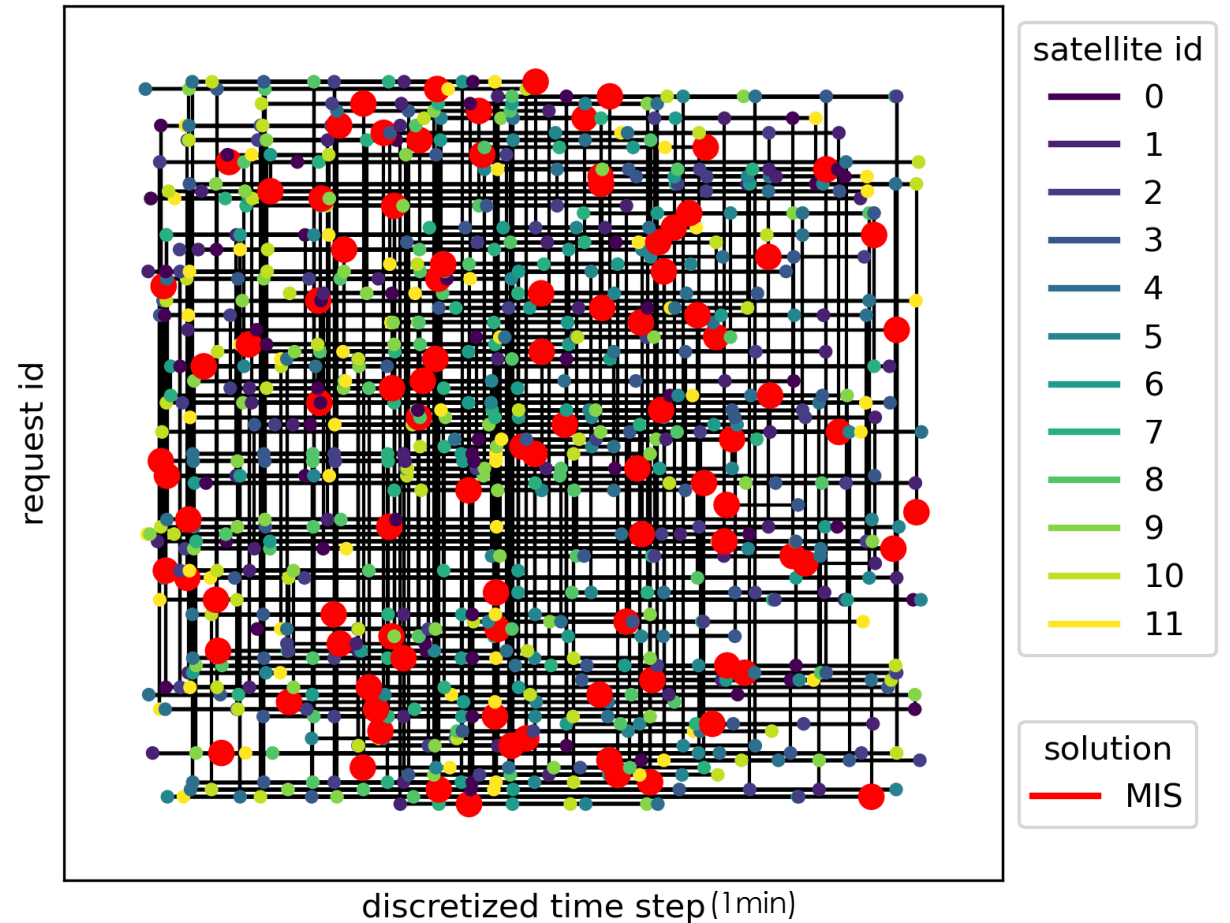
Optimization

Choice of data take opportunities

Classical Reference

MIS approximation algorithm

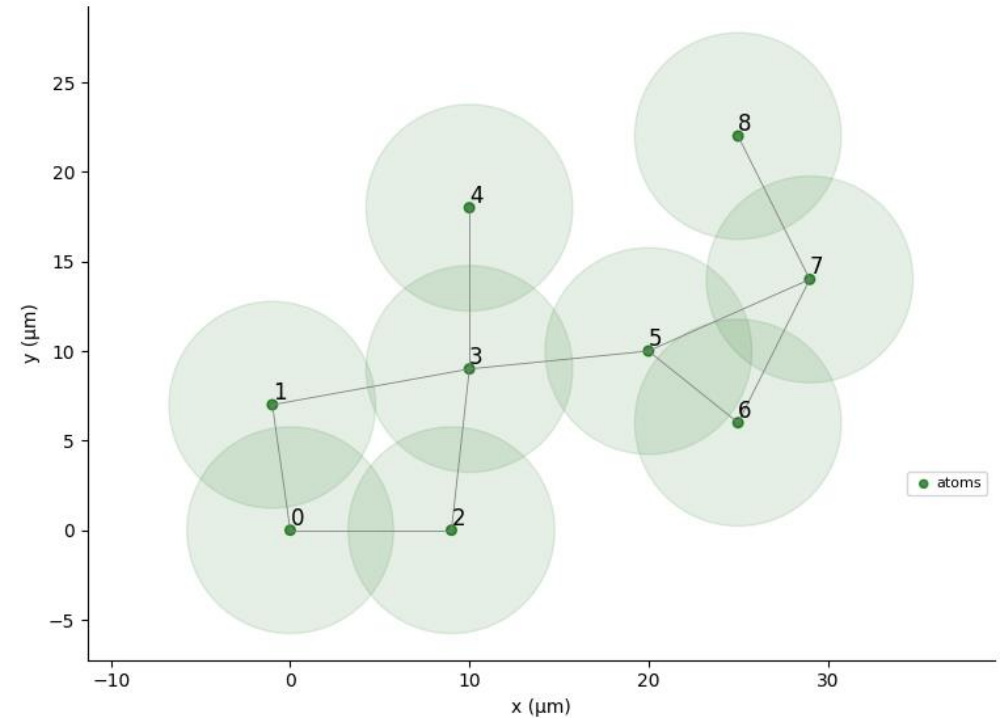
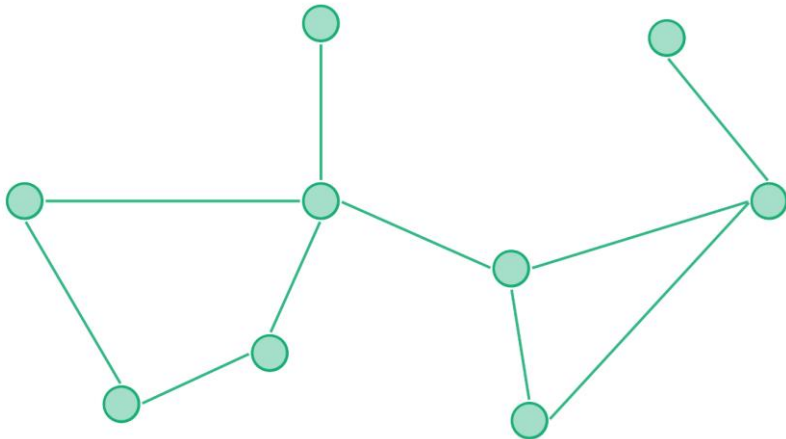
Visiting capitals with 12 shifted ISS



Solving the MIS on PASQAL QPUs

Maximum Independent Set (MIS) is a well-suited problem for Rydberg atoms

Flexible atoms positions allow us to easily tackle graph problems by directly encoding the graph with the positions of the atoms and the distances between them.

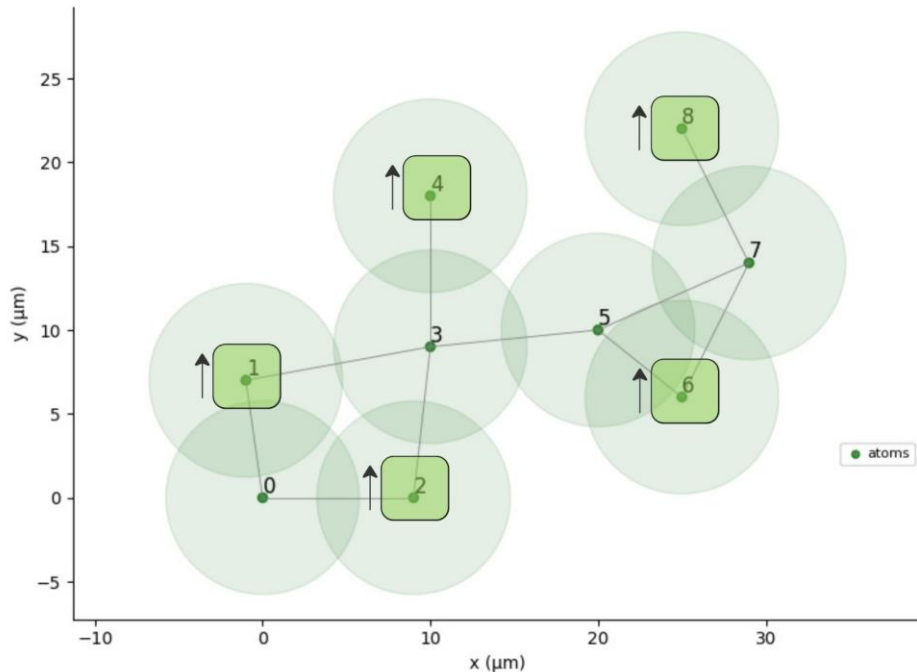


Solving the MIS on PASQAL QPUs

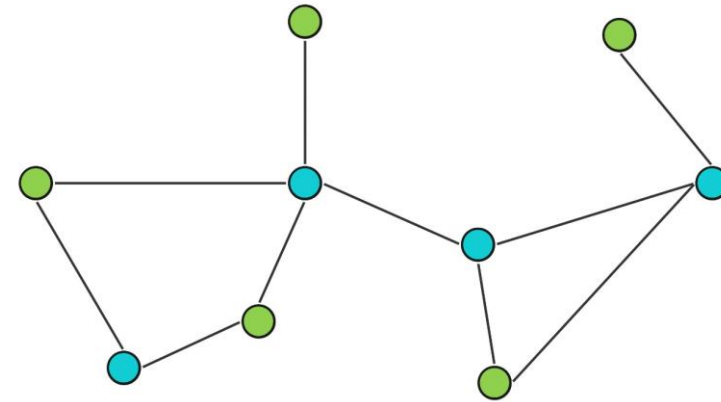
Maximum Independent Set (MIS) is a well-suited problem for Rydberg atoms

Rydberg dynamics can be leveraged to naturally encode the constraints and solution to the MIS problem for unit-disk graphs.

$$H/\hbar = \sum_i \underbrace{\frac{\Omega(t)}{2} \left(e^{i\varphi(t)} |g\rangle_i \langle r|_i + \text{h.c.} \right)}_{\text{Driving}} - \underbrace{\Delta_i(t) n_i}_{\text{Constraints}} + \underbrace{\sum_{i<j} \frac{C_6}{r_{ij}^6} n_i n_j}_{\text{Geometry}}$$



Mission Planning for Satellites on Pasqal QPUs



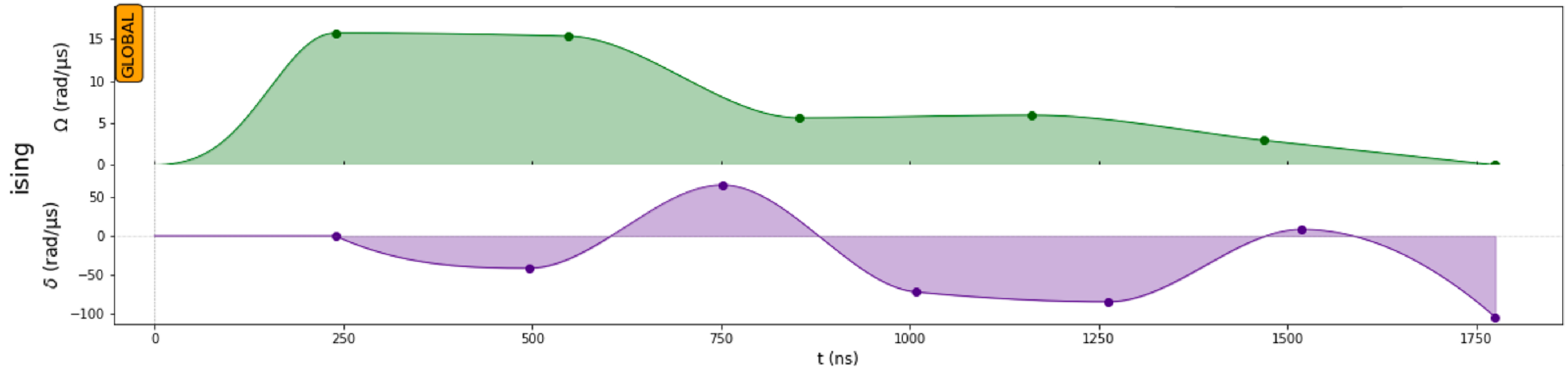
Pasqal Thoughts [Defining the Quantum Reality](#)

Solving the MIS on PASQAL QPUs

Maximum Independent Set (MIS) is a well-suited problem for Rydberg atoms

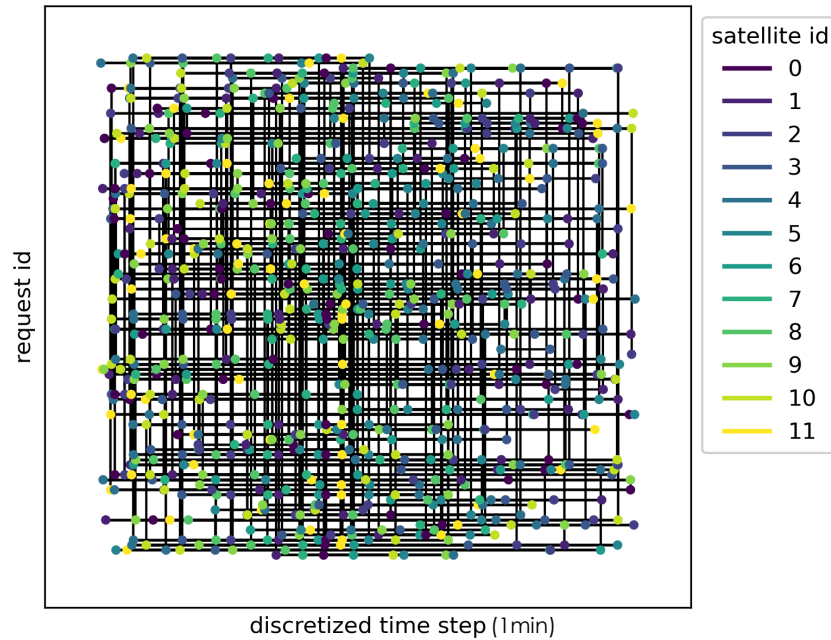
Devices operate in the analog mode

Using the natural dynamics of a system is more efficient and resilient to noise.

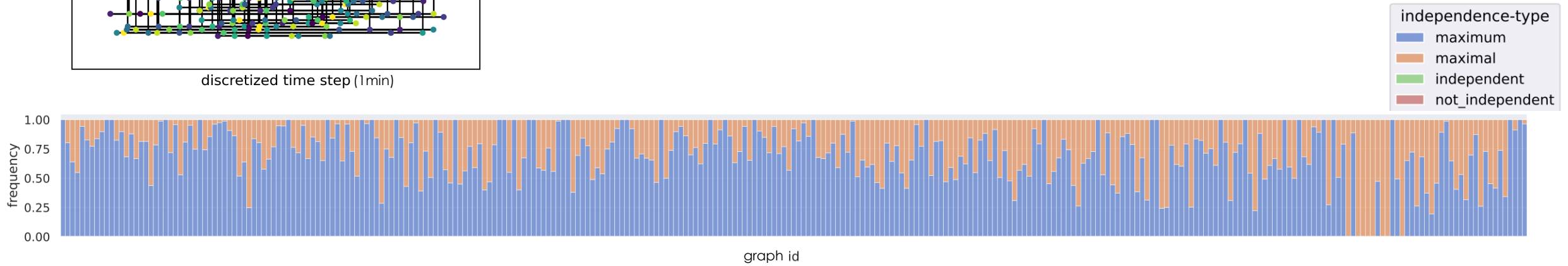


Encoding the problem in a Graph Structure

Maximum Independent Set (MIS) is a well-suited problem for Rydberg atoms



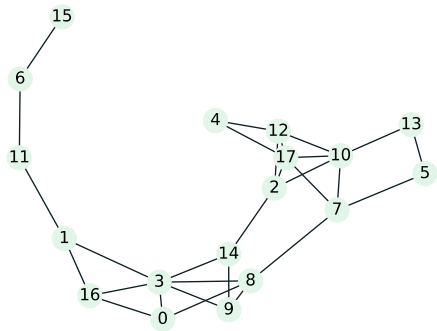
300 graphs of up to 25 nodes



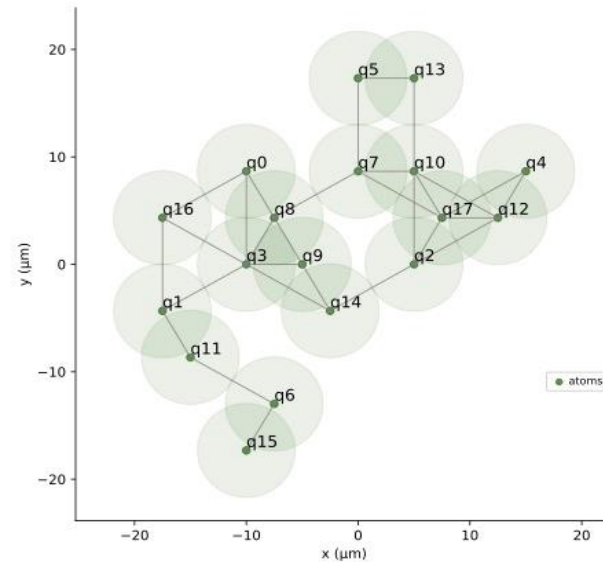
Adiabatic state preparation of MIS configurations

Maximum Independent Set (MIS) is a well-suited problem for Rydberg atoms

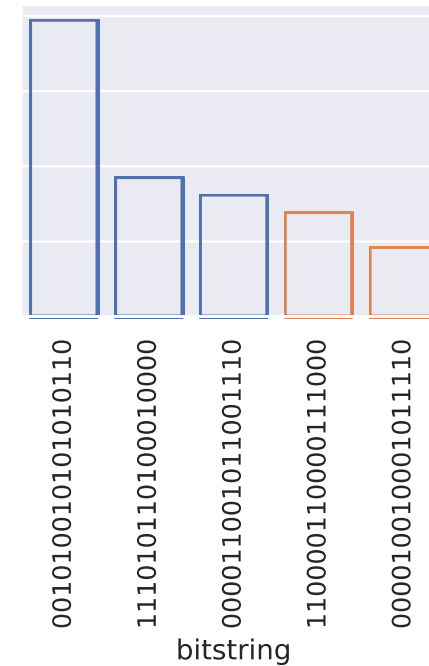
Original Graph



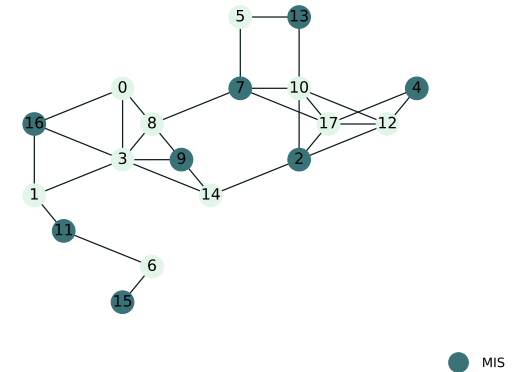
Embedding State preparation



Result Distribution



Maximum Independent Set

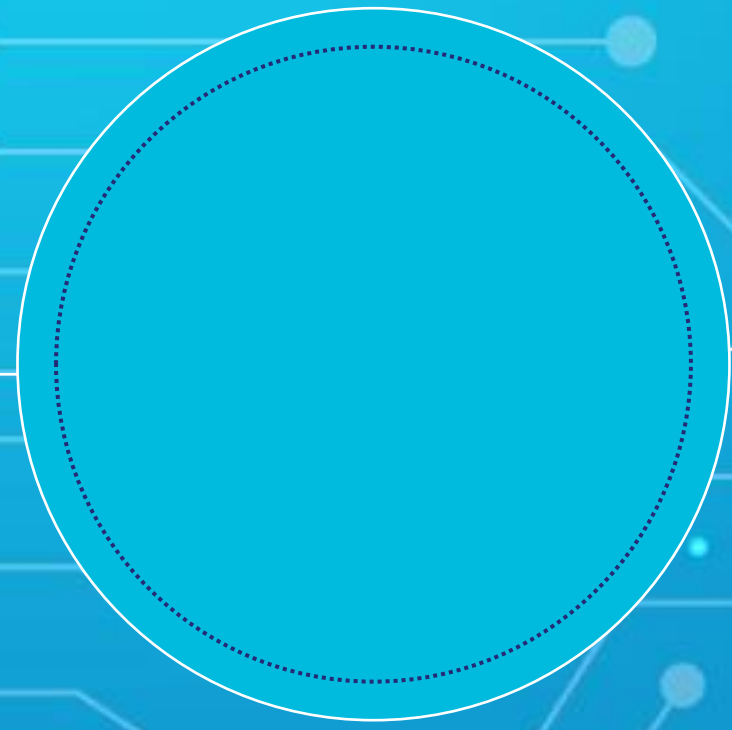


A quantum solution to a **real-world industrial problem running on a QPU today.**

Thales is preparing the next steps to scale up the operational use of this method

Pause café – 15'



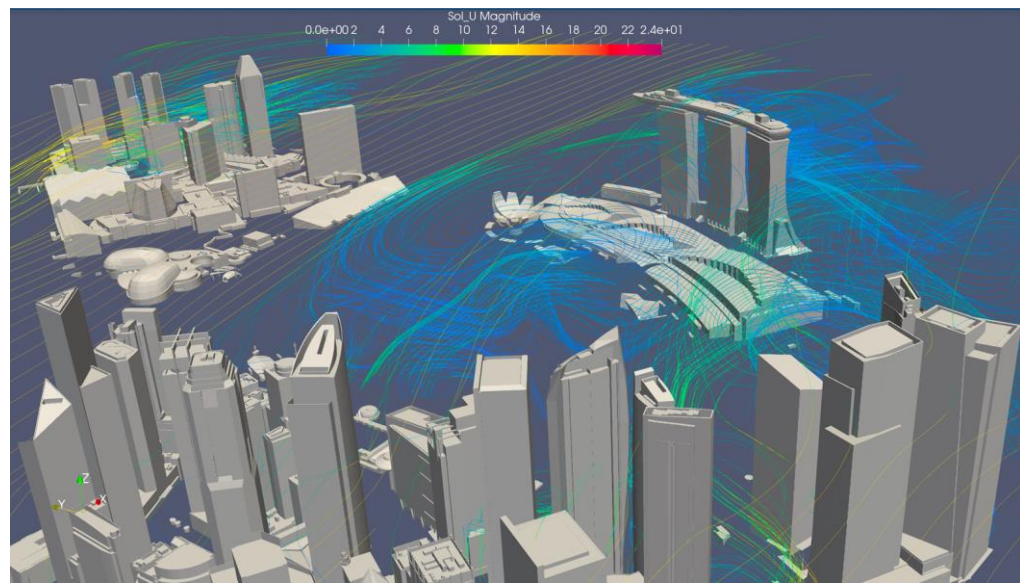


AQGeTAD: DRONE TRAJECTORY OPTIMIZATION UAS TRAFFIC MANAGEMENT Use-Case

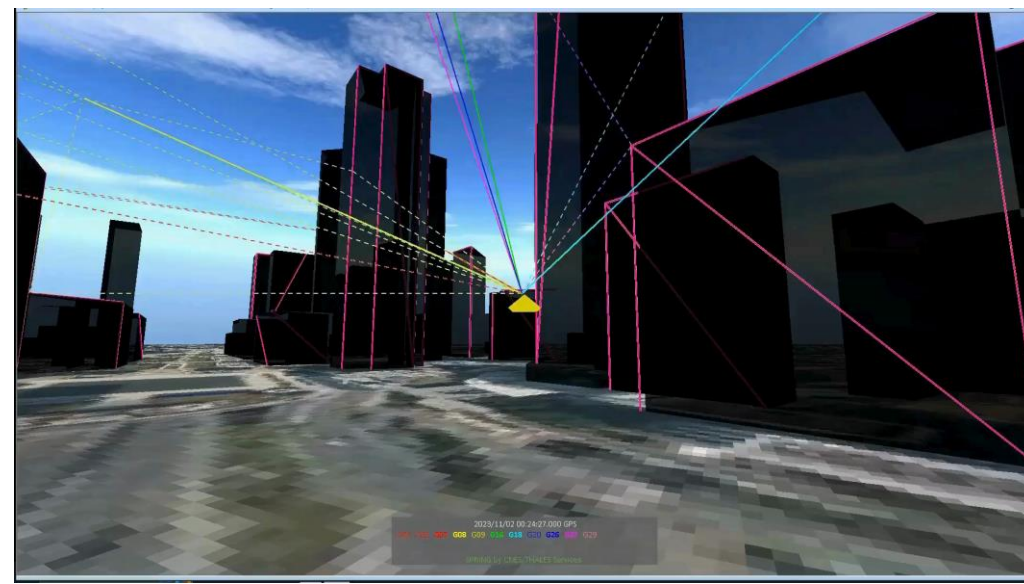
QUANTUM COMPUTING SHAPING THE FUTURE OF UTM

Frédéric **BARBARESCO**
Quantum Algorithms & Computing
Segment Leader
THALES

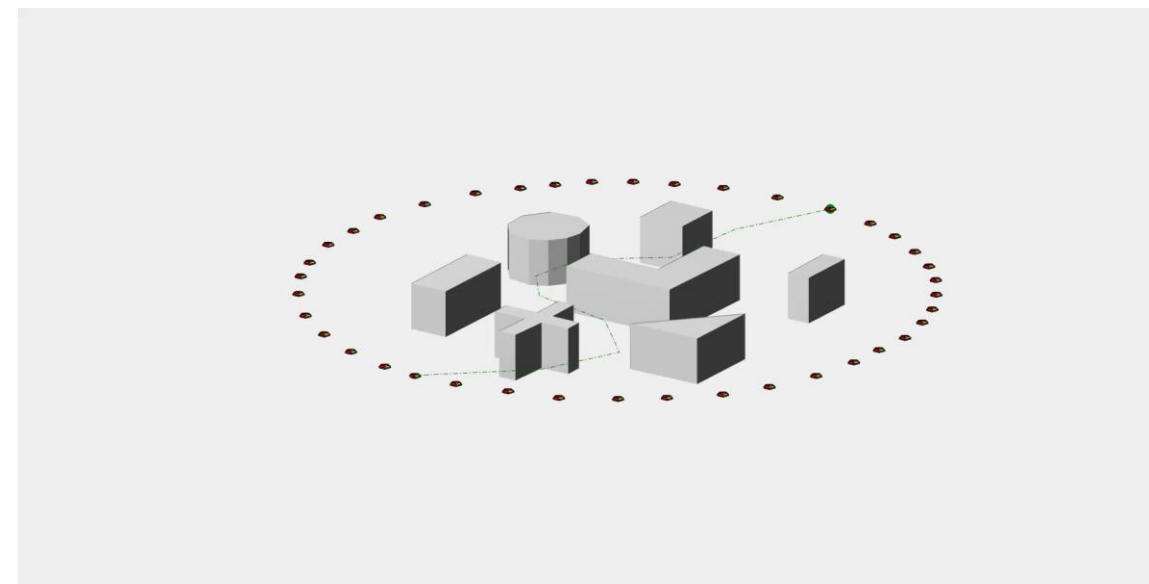




Wind/Turbulence Maps
(NO-FLY Zone)



GNSS Drone
Positioning Accuracy



Drone Trajectory
Optimization



Trajectory
Computation
on QPU

THALES Topsky UAS

Mission
Planning

UAV Operation
planning

Strategic	Tactic	Authority
TopSky – UAS Airspace Manager		
AIM & GIS	Conformance Monitoring	
Authorization & Notification	Strategic Deconfliction	
Risk Management	Fairness monitoring	
Emergency management	Noise management	

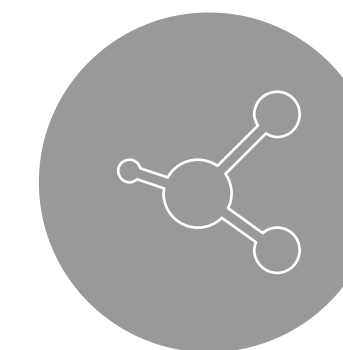
TopSky - UAS
Surveillance

Traffic &
Surveillance

Remote ID Service



Manage airspace
access

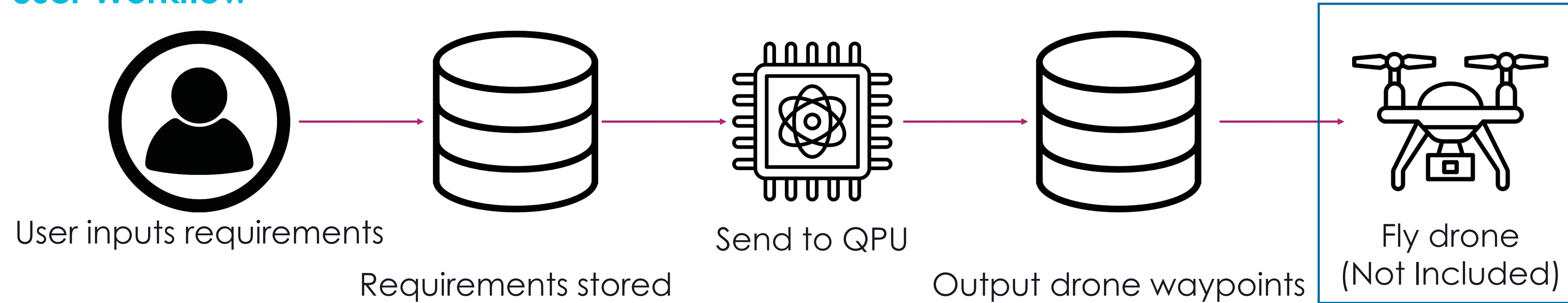


Monitor traffic
conformance

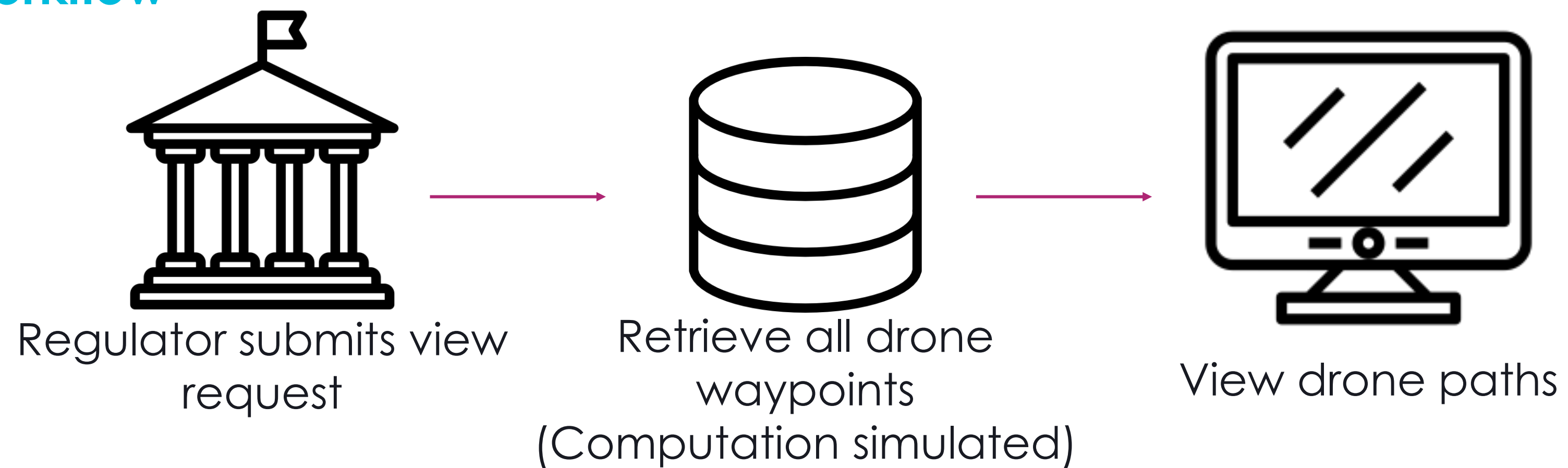


QPath end-to-end workflow

User Workflow

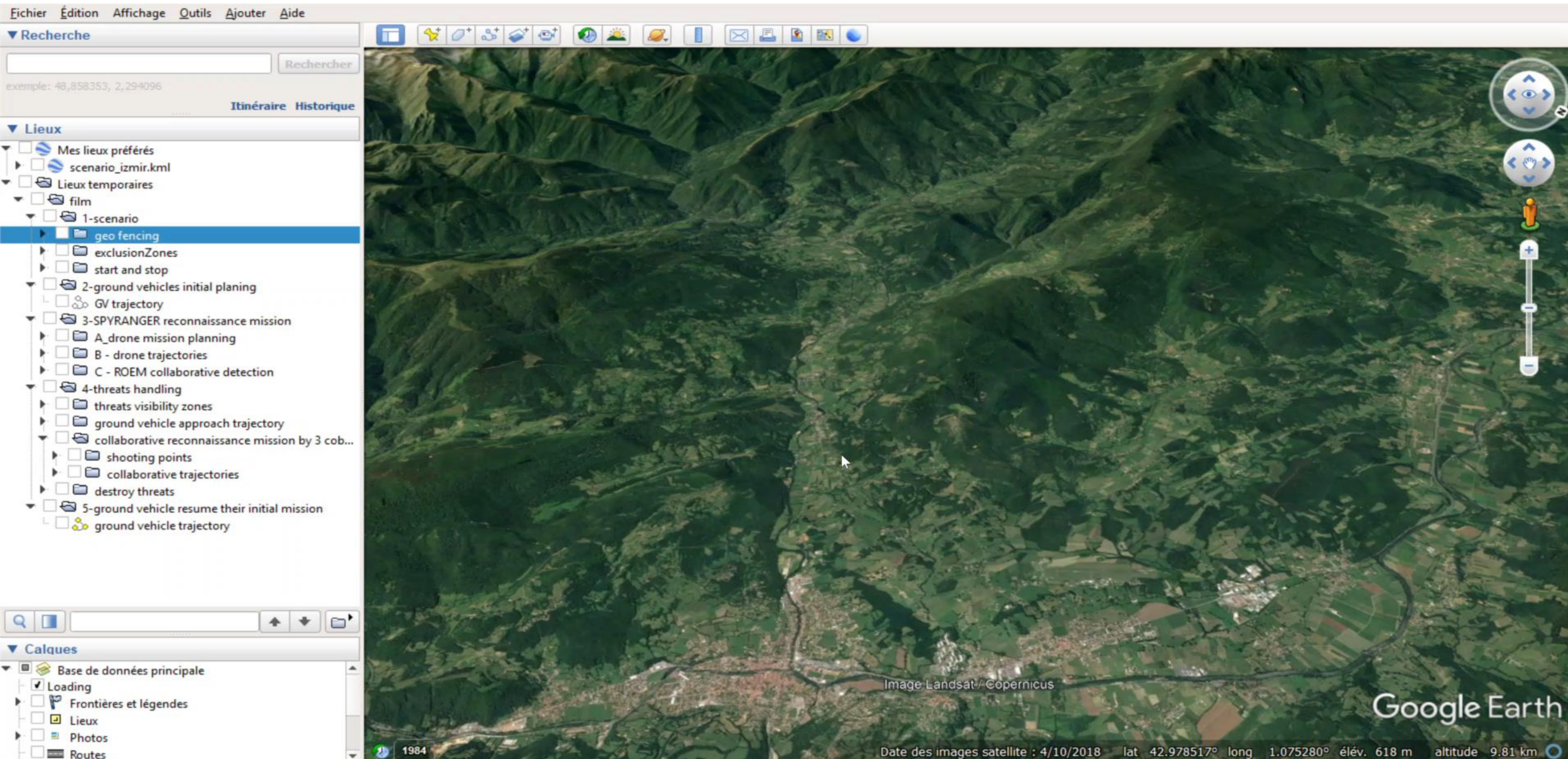


Regulator Workflow



Other applications: Mission-planning for collaborative **fleet/swarm** of drones

(safe landing proximity constraints, autonomy/energy constraints, « nofly zone » constraints, Gnss-Denied positioning accuracy constraints, communication constrained, observation constraints, ...)



QUANDELA

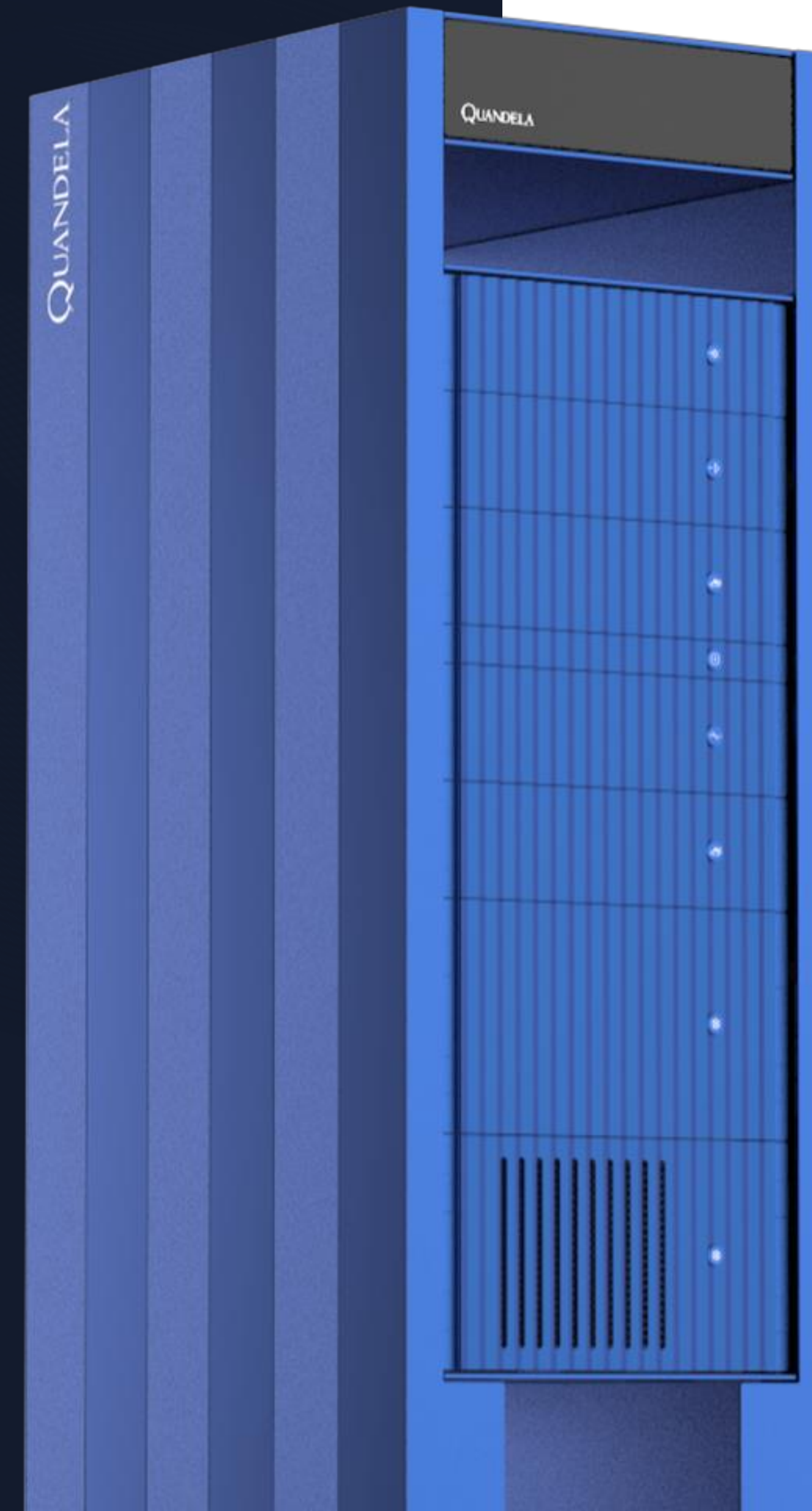
THALES

AQGeTAD - Quantum advantage for drone traffic management

Optimisation of drone trajectories using single photons decision making

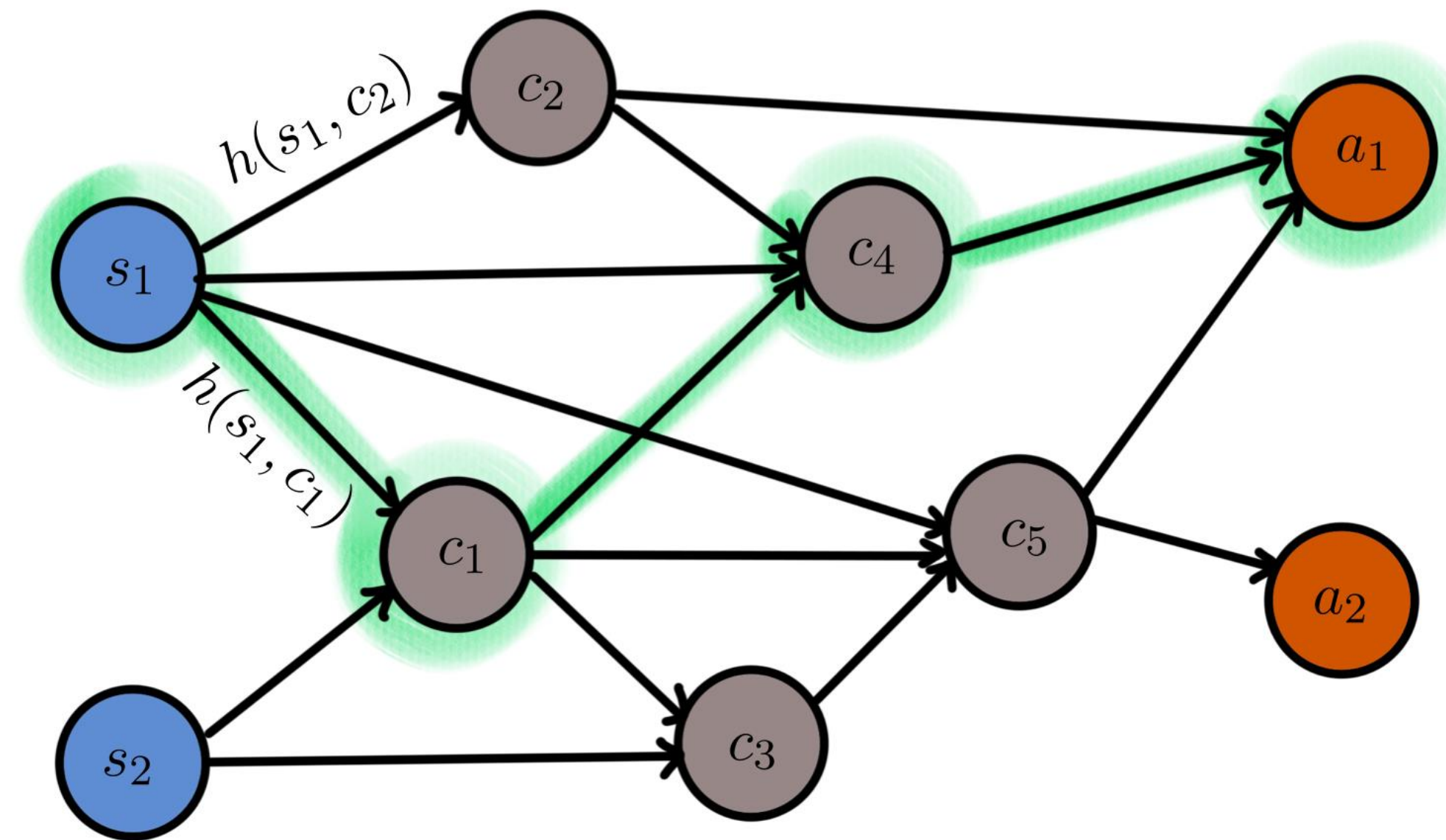
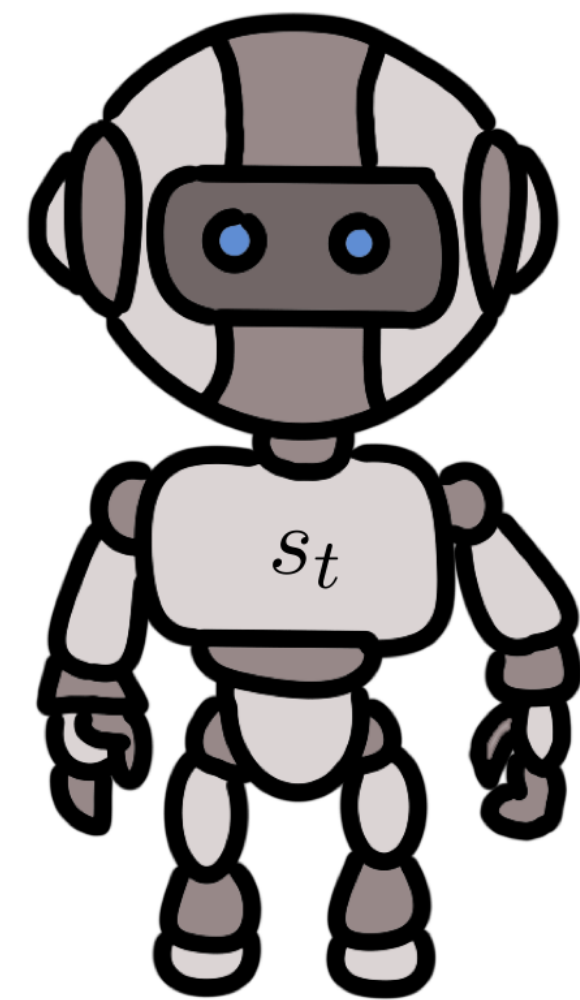
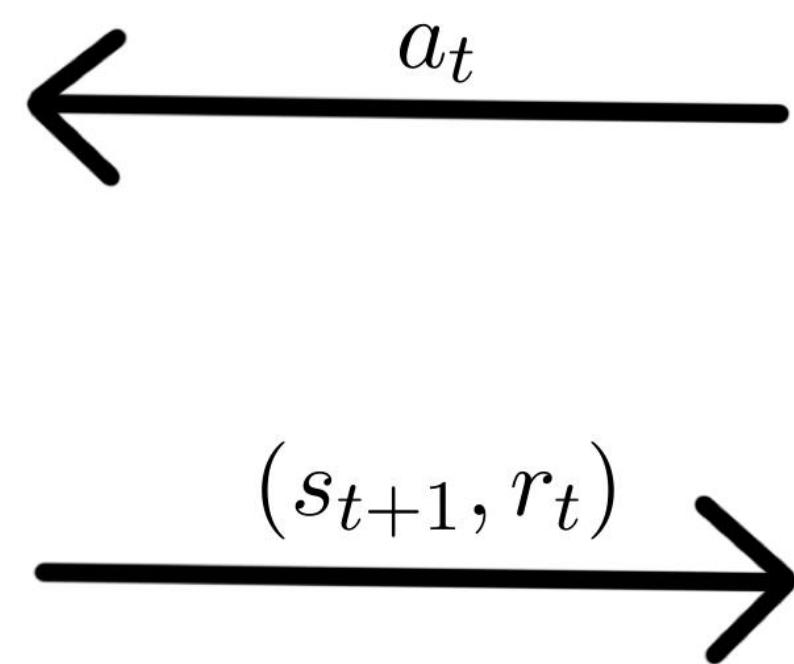
Arno RICOU

Credits to Giacomo FRANCESCHETTO for slides



Projective Simulation Reinforcement Learning and Decision Making

Environment

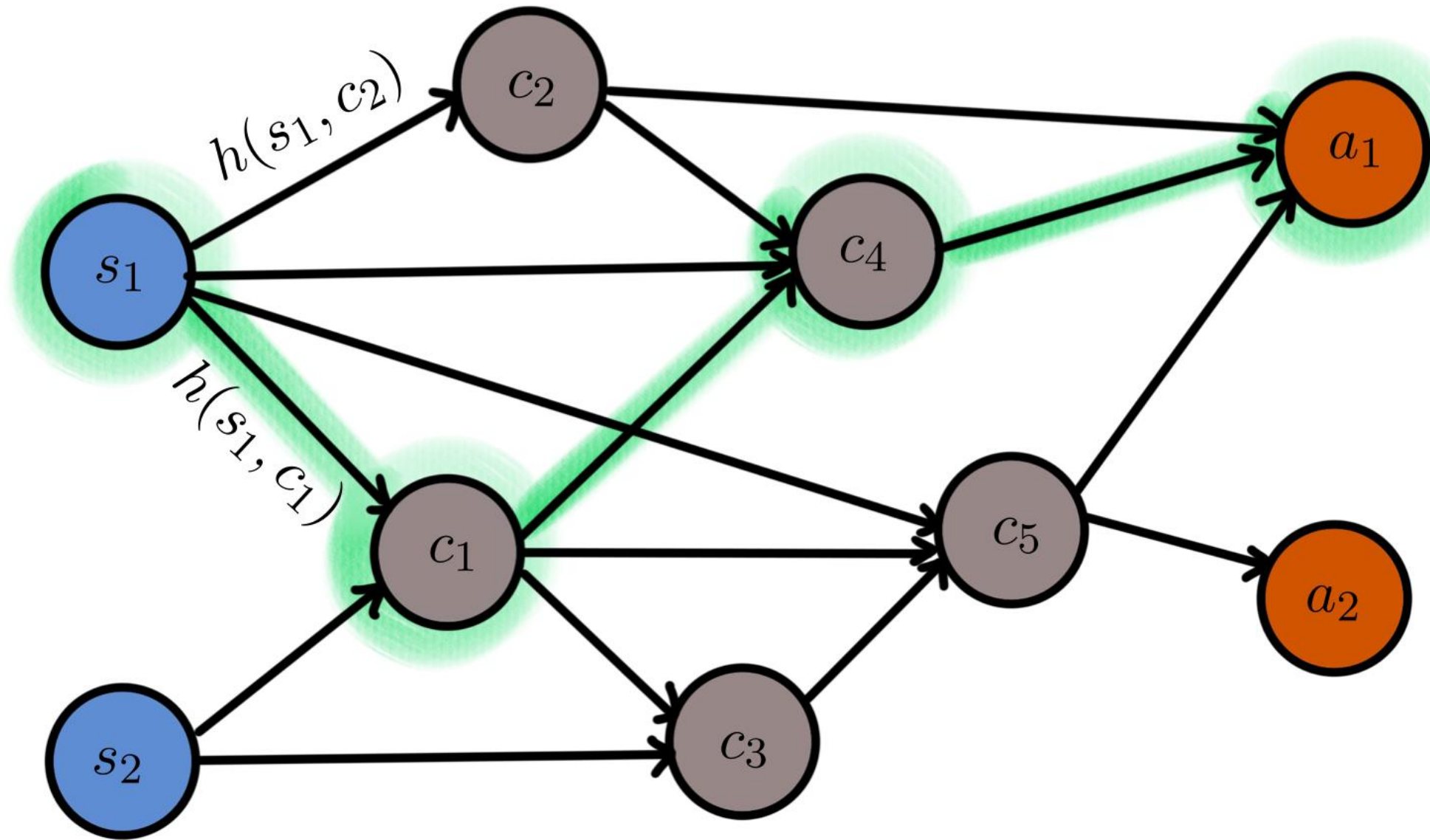


goal: maximize the long term accumulated reward

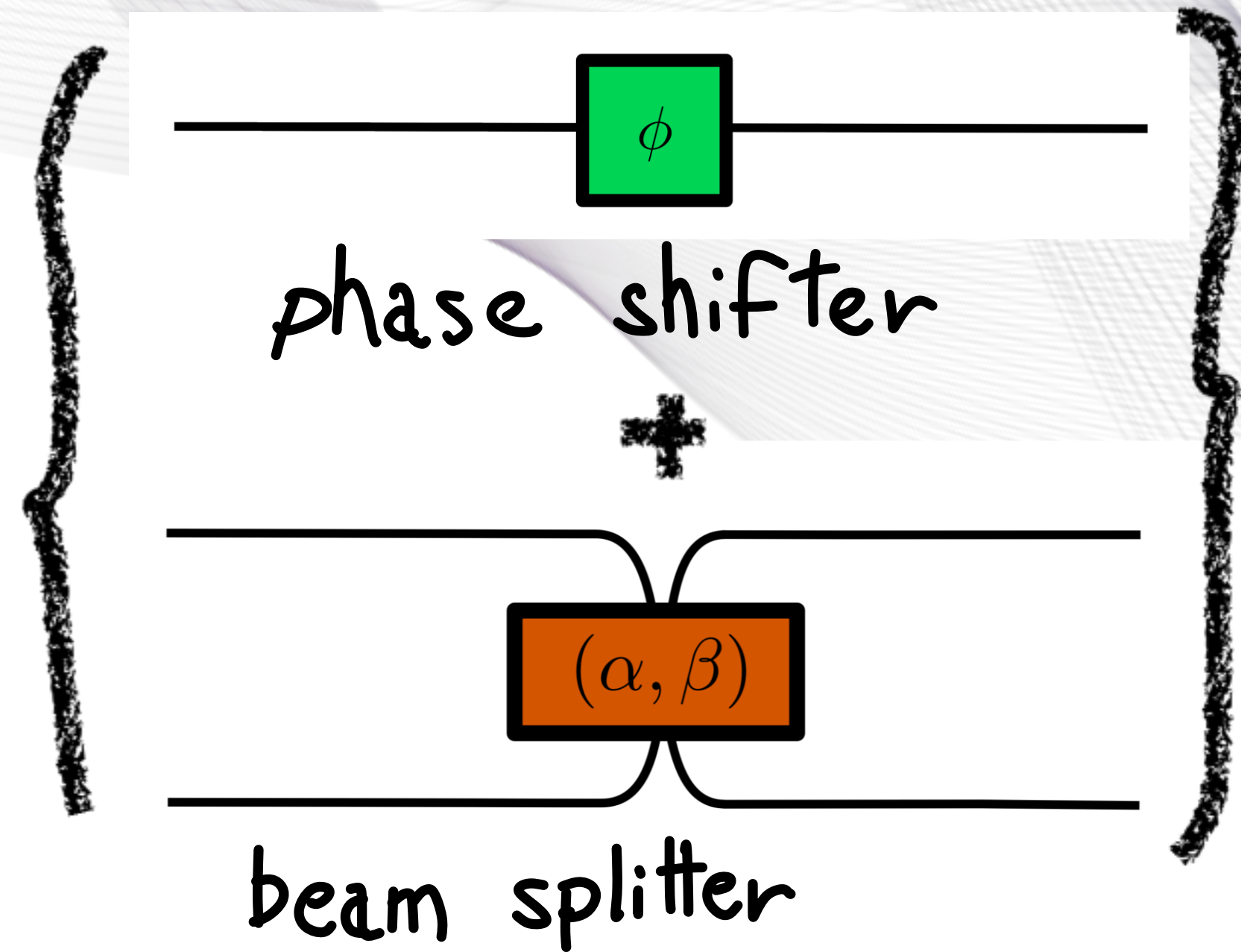
random walk through the Episodic Compositional Memory

Quantum Optical Projective Simulation

Quantized episodic compositional memory (ECM)



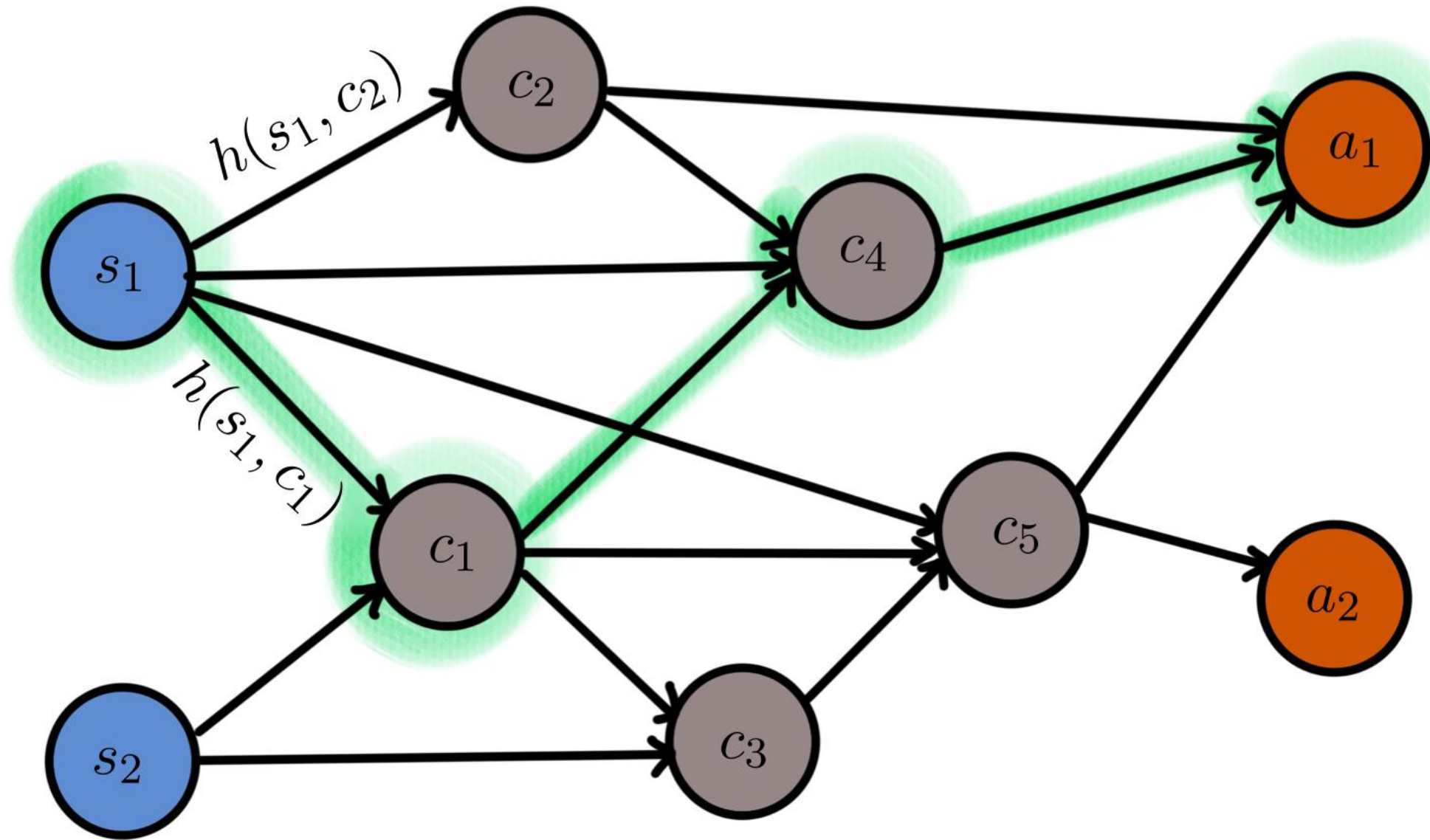
classical ECM



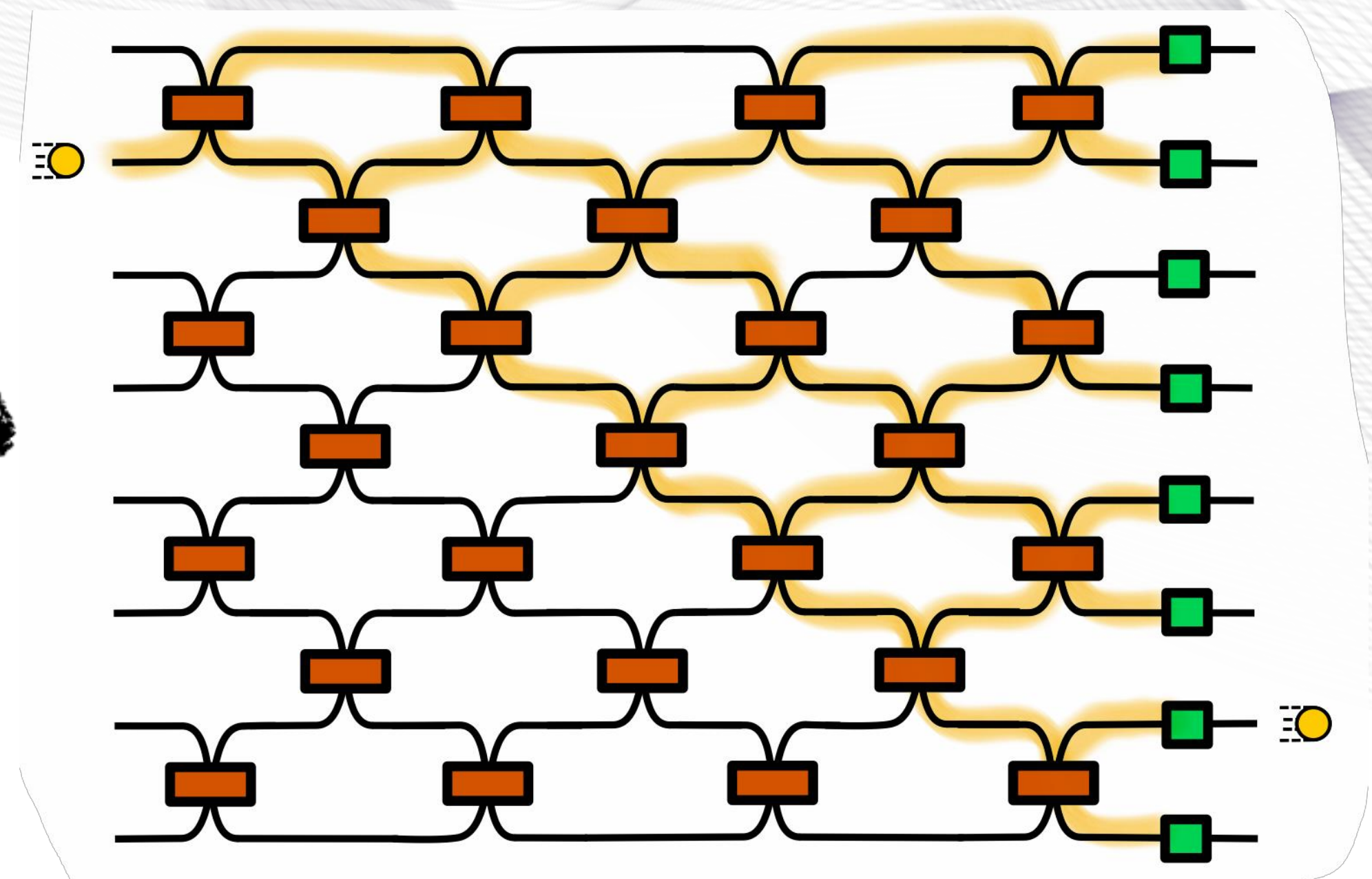
quantum ECM

Quantum Optical Projective Simulation

Quantized episodic compositional memory (ECM)



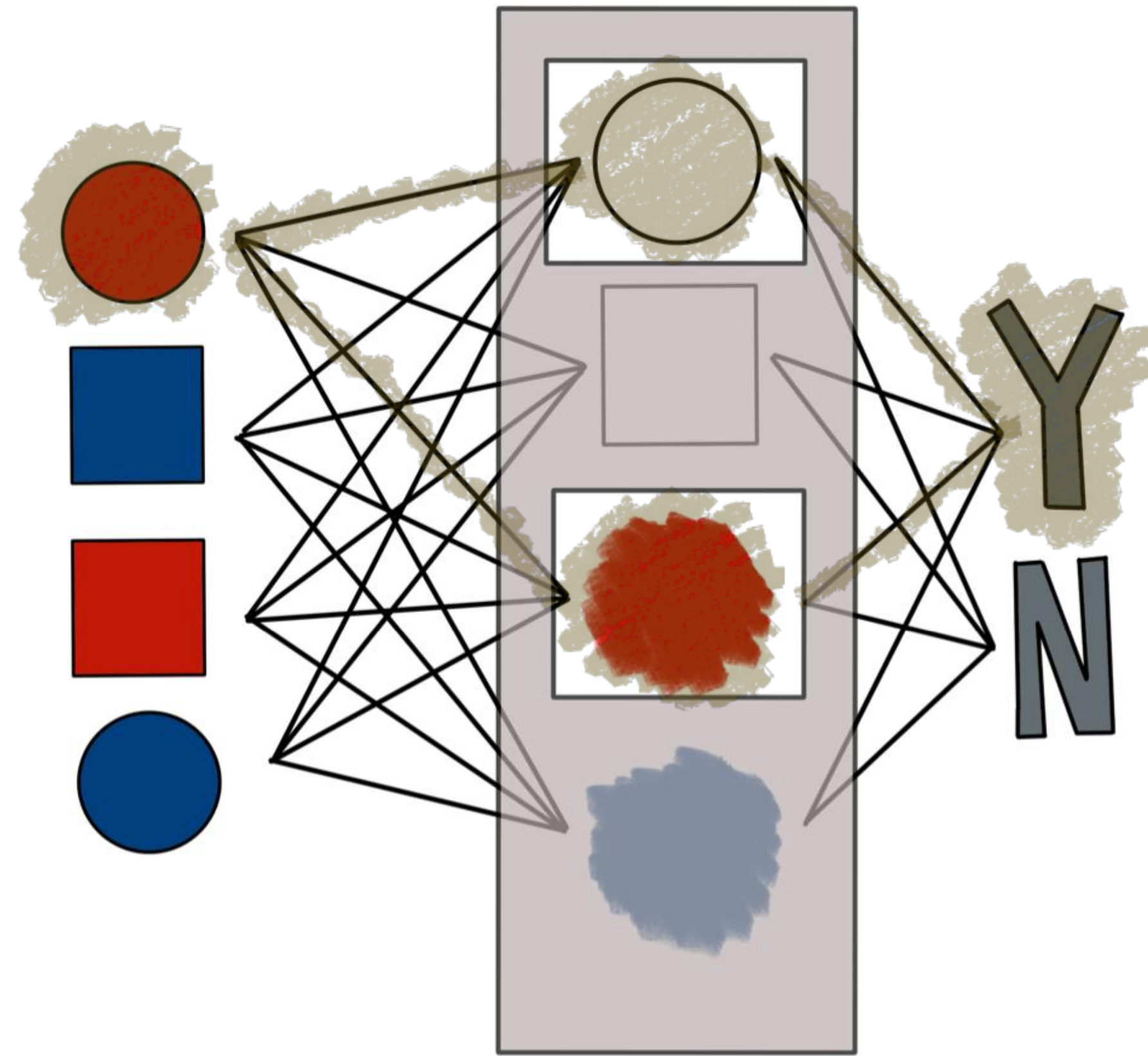
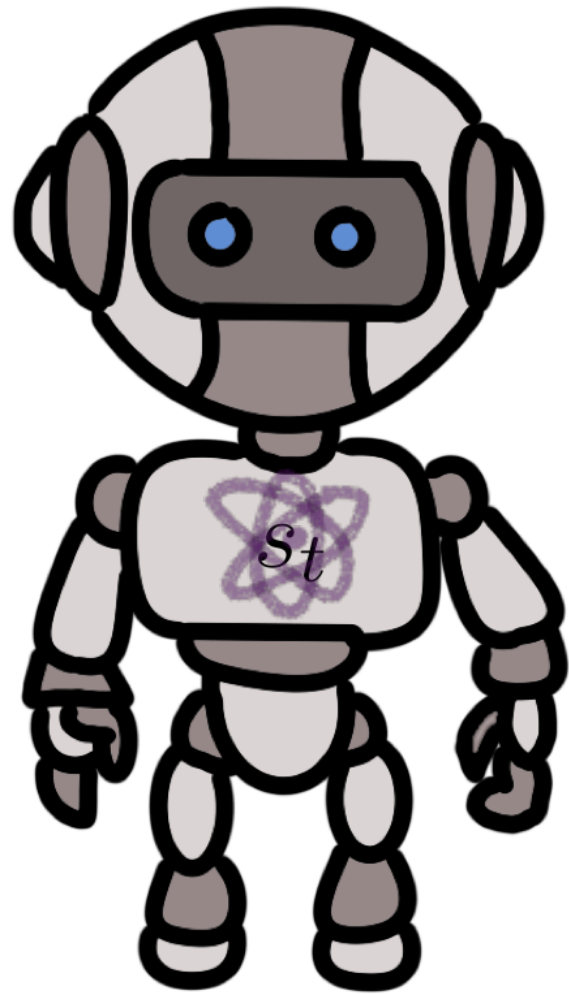
classical ECM



quantum ECM

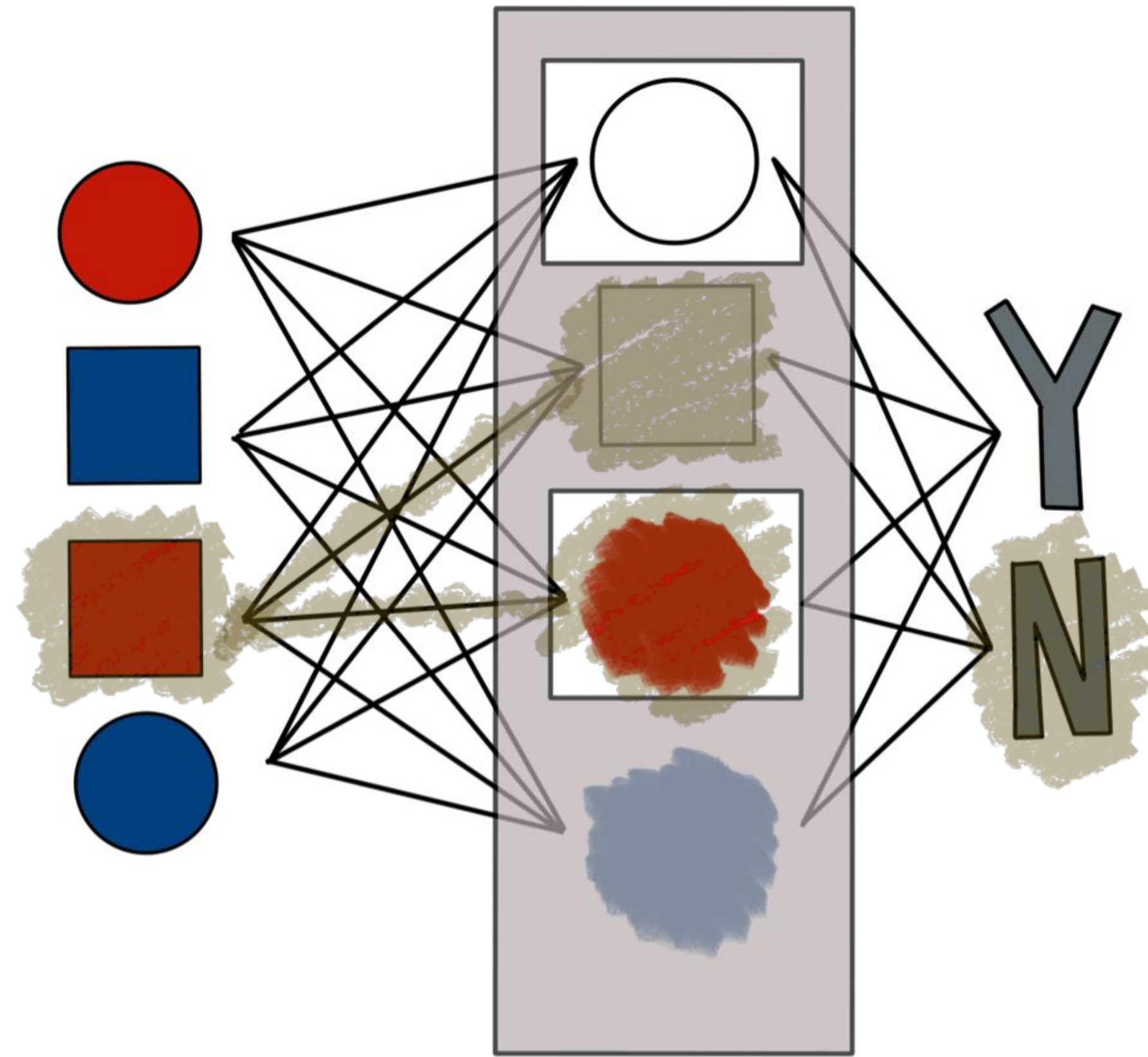
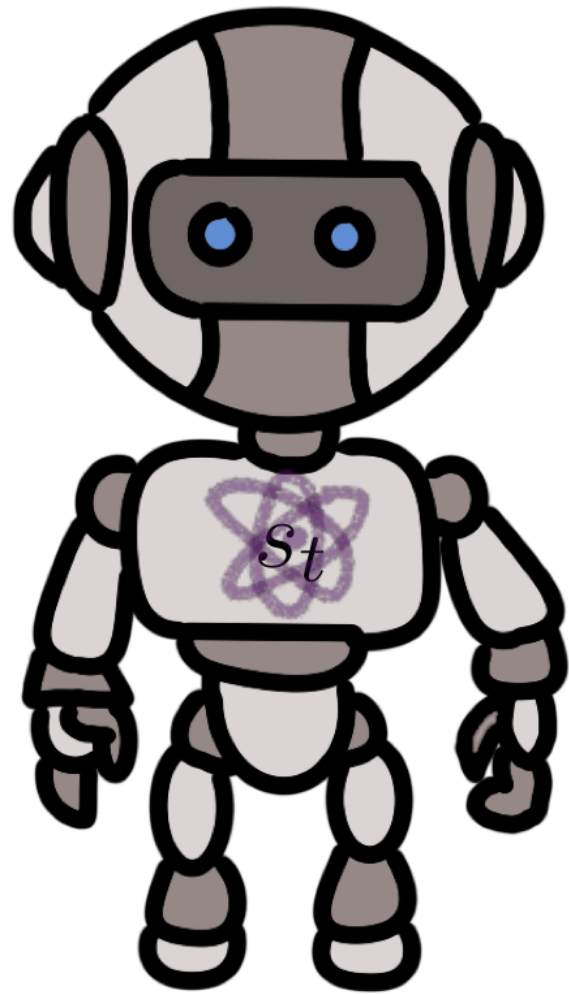
Quantum Optical Projective Simulation

A transfer-learning scenario : final stage



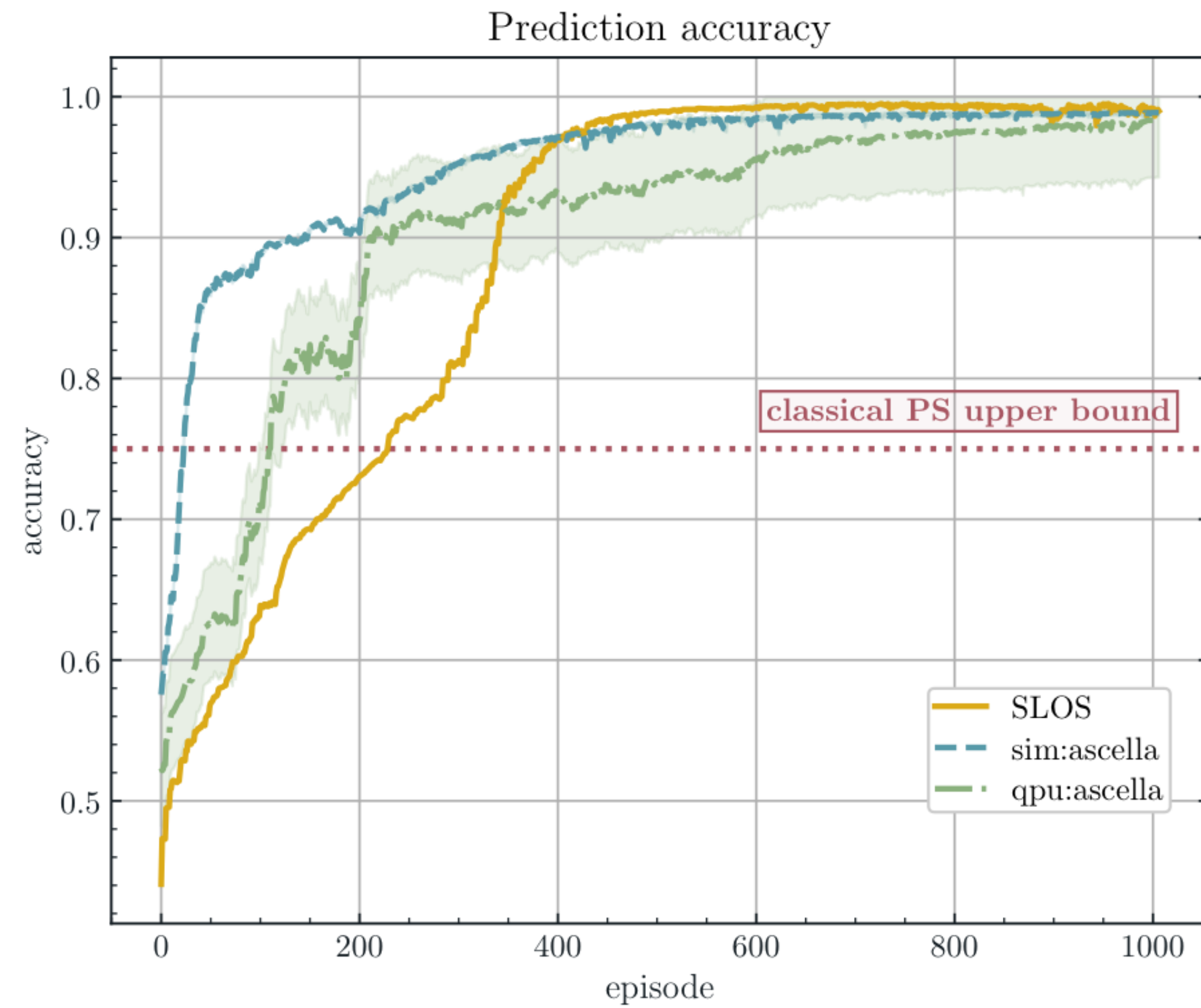
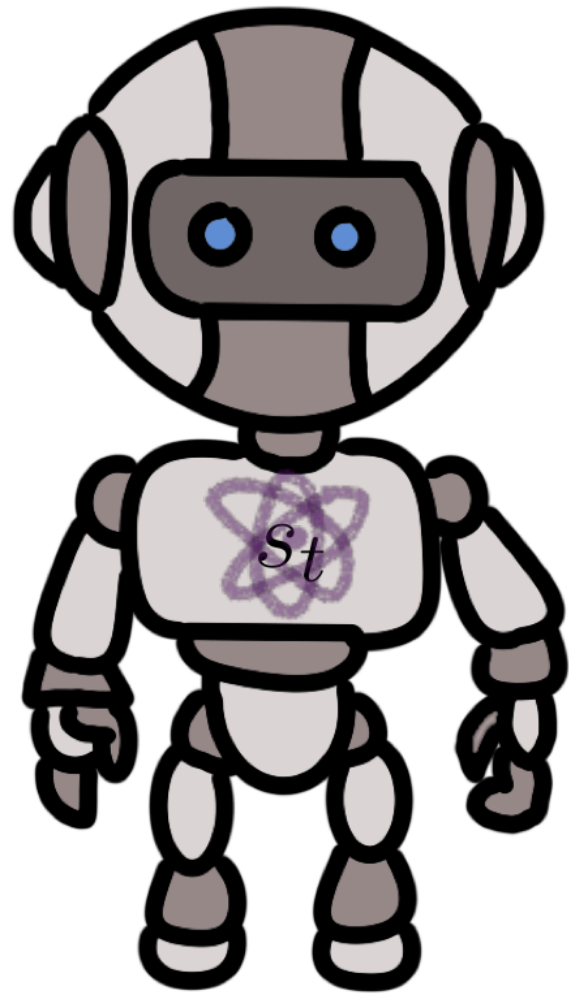
Quantum Optical Projective Simulation

A transfer-learning scenario : final stage



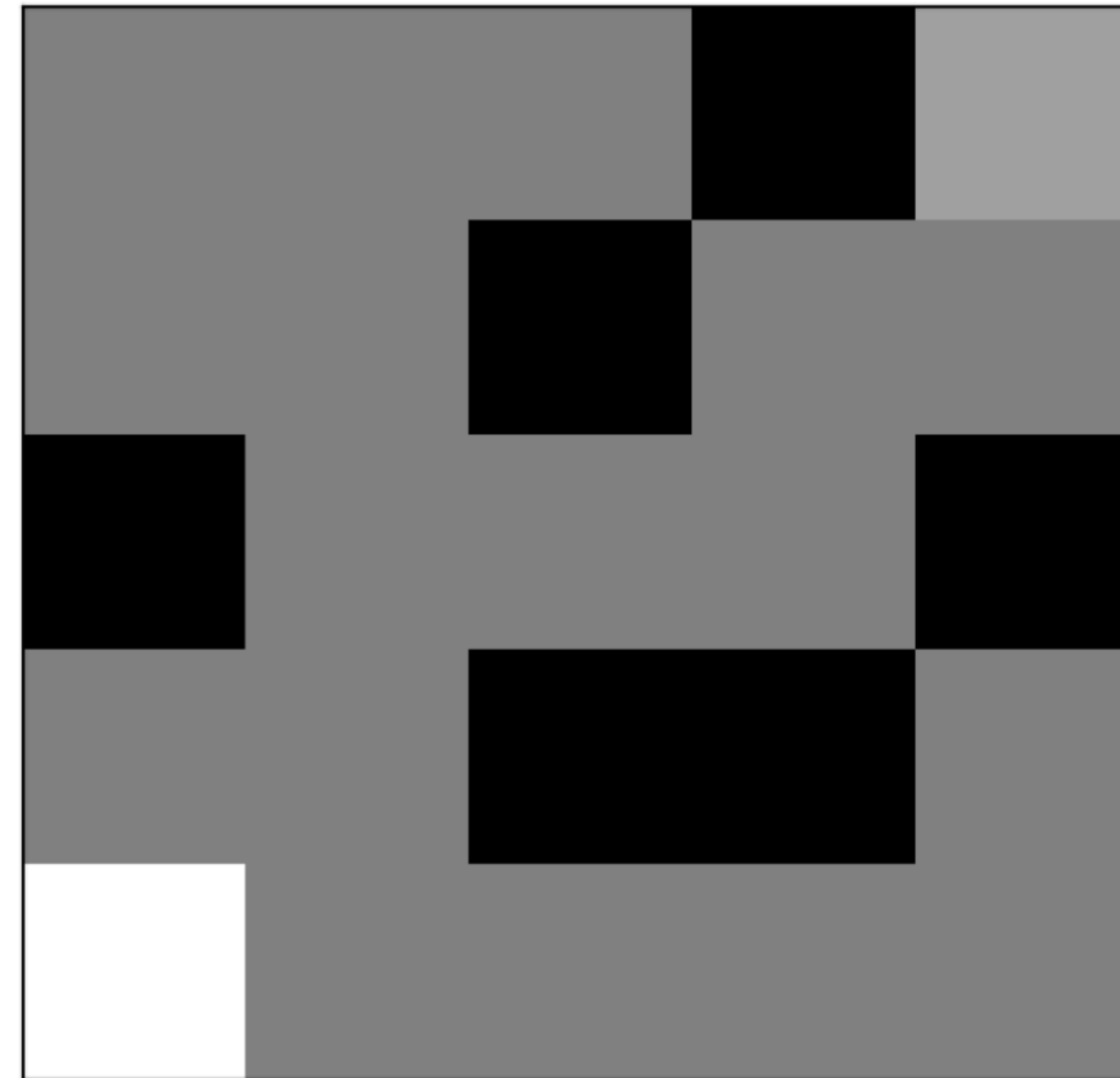
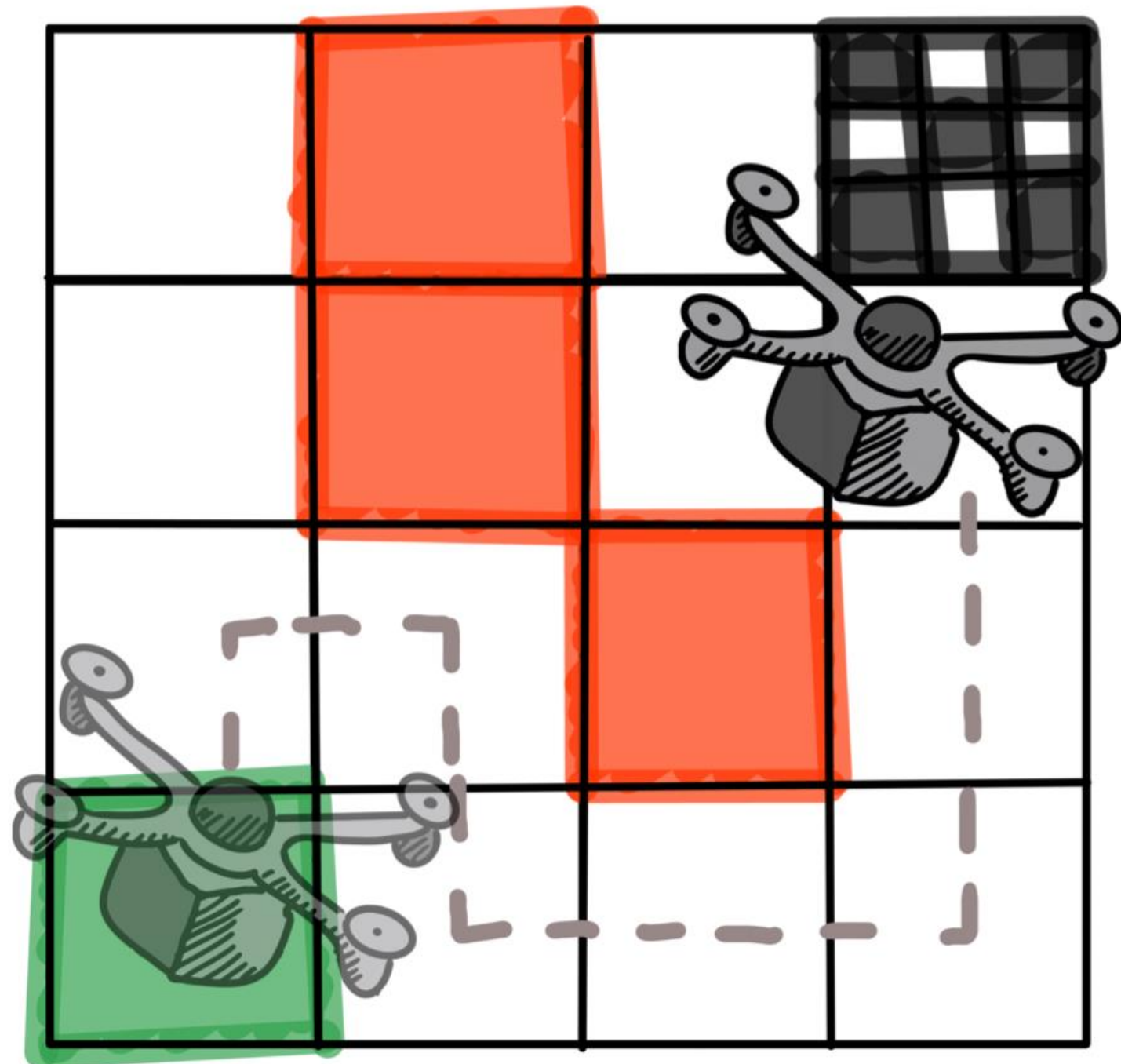
Quantum Optical Projective Simulation

A transfer-learning scenario : final stage







Quantum Optical Projective Simulation

QOPS solving a grid path-finding like problem

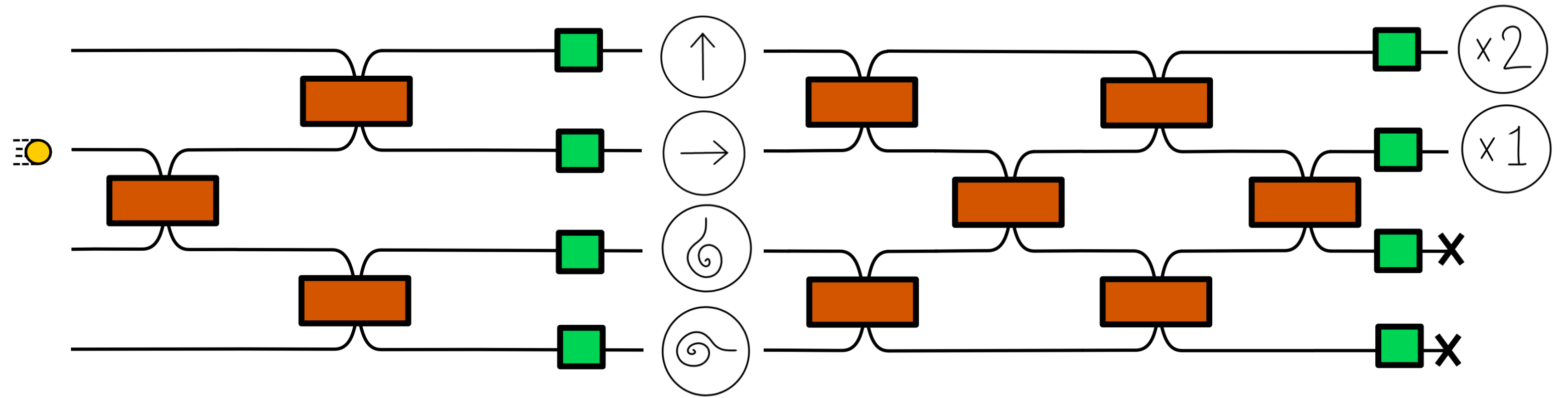
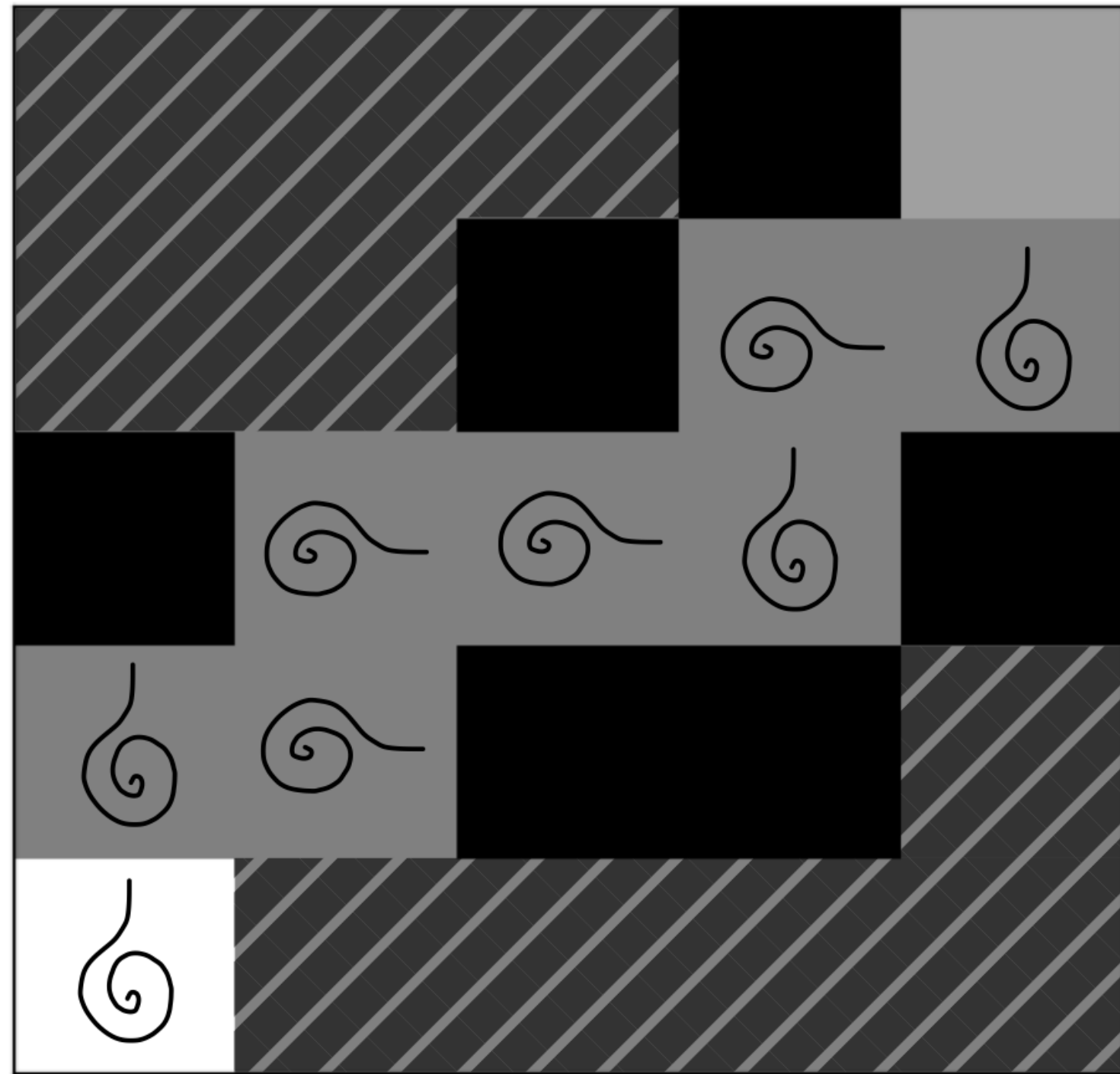


legend

	obstacle
	cell
	start
	finish

Quantum Optical Projective Simulation

QOPS solving a grid path-finding like problem



<i>grid point</i>	<i>direction</i>	<i>wind</i>	SLOS	
			p_{single}	p_{double}
(0, 0)	up	down	0.001	0.999
(0, 1)	right	down	0.993	0.007
(1, 1)	up	left	0.993	0.007
(1, 2)	right	left	0.000	1.000
(2, 2)	right	left	0.002	0.998
(3, 2)	up	down	0.000	1.000
(3, 3)	right	left	0.000	1.000
(4, 3)	up	down	0.000	1.000

Q Next steps

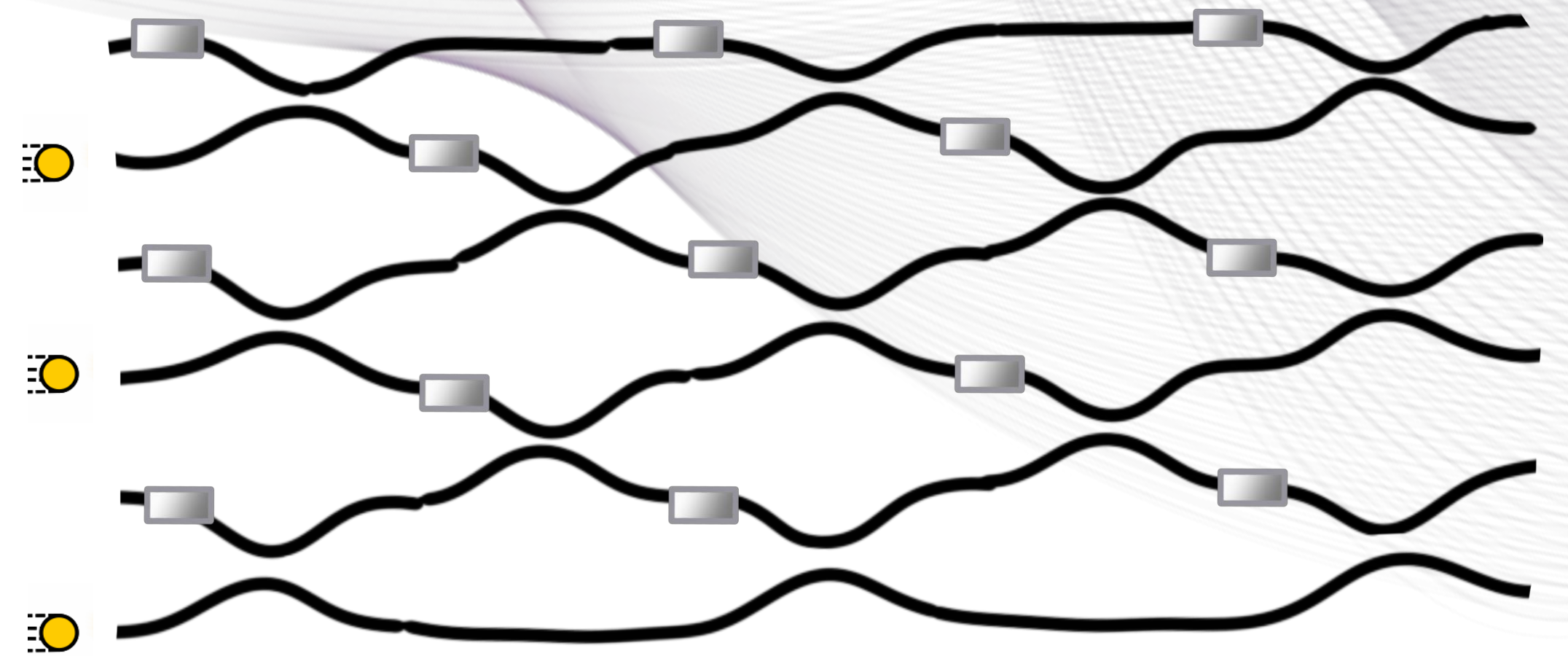


We also studied and will discuss this afternoon :

- *Multi-photon in the quantum ECM*
- *Entangled photons in quantum ECM*
- *New applications for collision prevention with drones*

And plan to :

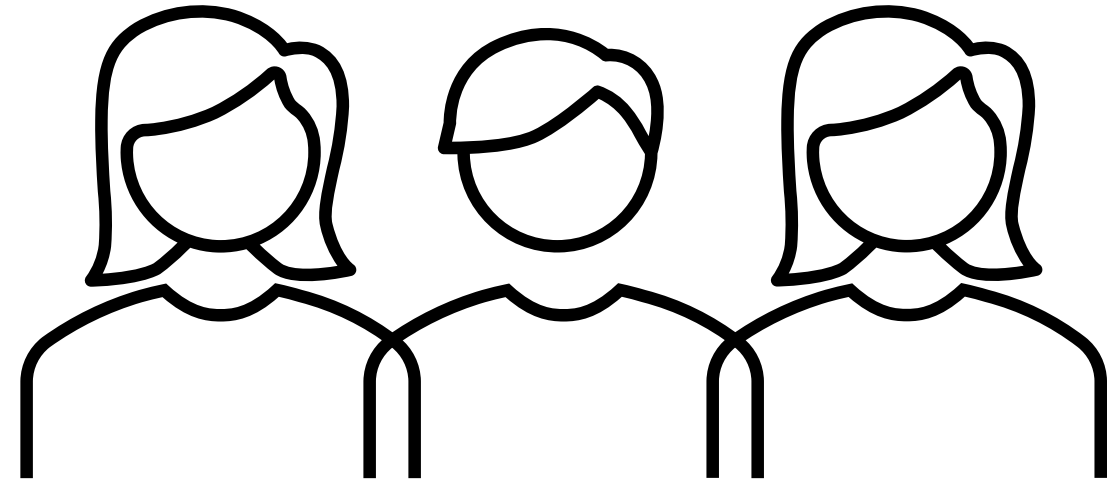
- *Implement on QPU multi-photon quantum ECM for collision prevention*
- *Optimize resources (modes, photons, parameters)*
- *Benchmark with classical SoA and predict when quantum advantage will happen*



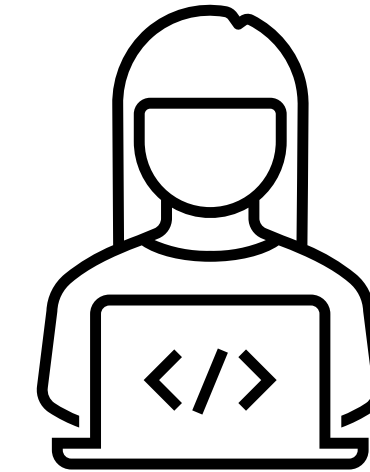
quantum ECM with multiple photons



Recruitment and advancement



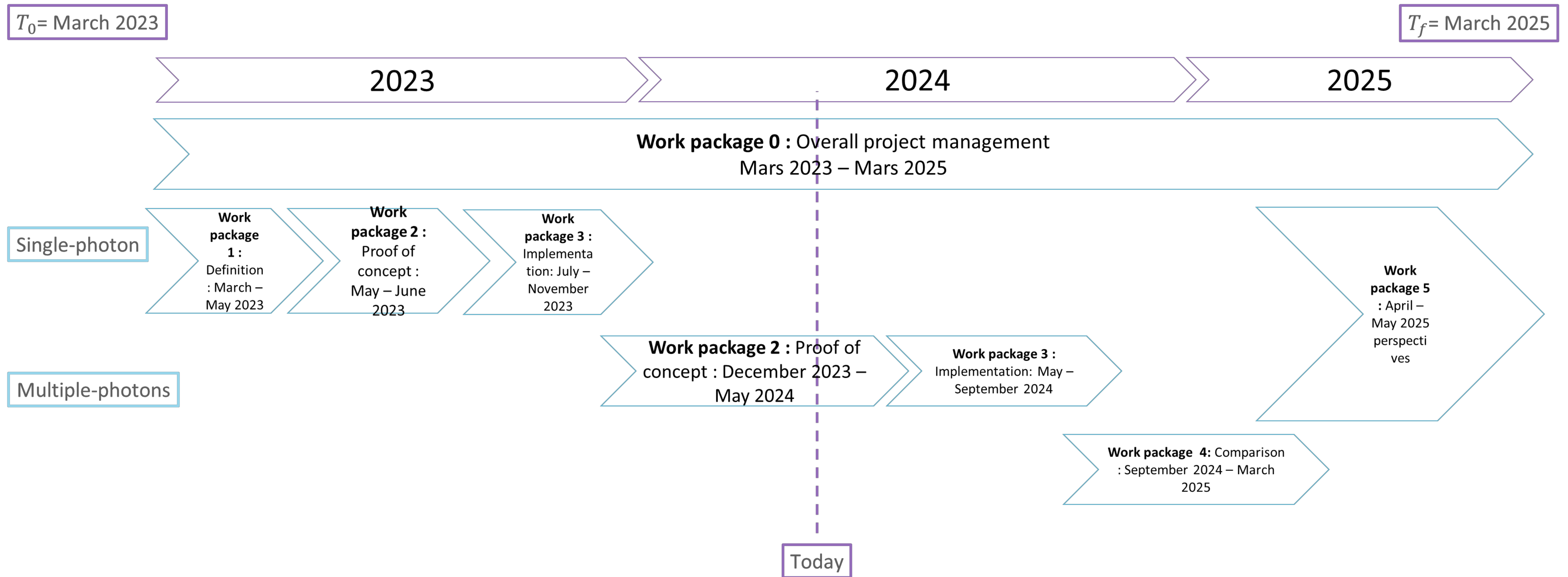
3 internships of six months recruited by Quandela for AQGeTAD



1 applications engineer working on it



Work breakdown structure



QUANDELA

ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

AQCMA - Quantum advantage for aerospace engines design

Solving combustion differential equation on a photonic quantum neural network





ONERA
THE FRENCH AEROSPACE LAB

Solving differential equations for fluid mechanics represent 95% of ONERA internal use of computing time

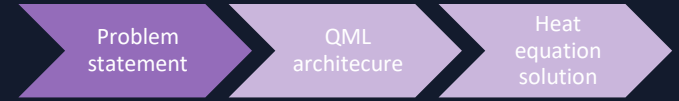


- Fluid mechanics problems are separated in two : combustion and aerodynamics.
- Combustion alone requires a lot of computing power, thus **electricity bill is consequential.**
- Combustion reaction are hard multi-physics problem. Better understanding of them would lead to **engines polluting less with a better efficiency.**



Problem statement : 1D-laminar flame equation with 2 reactants

ONERA
THE FRENCH AEROSPACE CO.



Problem statement :

$$\begin{aligned}\partial_x \dot{m} &= 0 \\ \dot{m} \partial_x Y_1 - \frac{\lambda}{c_p} Le^{-1} \partial_x^2 Y_1 &= -\tilde{A} T Y_1 \\ \dot{m} \partial_x T - \frac{\lambda}{c_D} \partial_x^2 T &= \tilde{\Delta}_h \tilde{A} T Y_1,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{m} Y_1(-\infty) &= \dot{m} Y_1(x_0) - \frac{\lambda}{c_p} Le^{-1} \partial_x Y_1(x_0) \\ \dot{m} T(-\infty) &= \dot{m} T(x_0) - \frac{\lambda}{c_p} \partial_x T(x_0) \\ \partial_x Y_1(x_N) &= 0 \\ \partial_x T(x_N) &= 0,\end{aligned}$$

Classical solution :

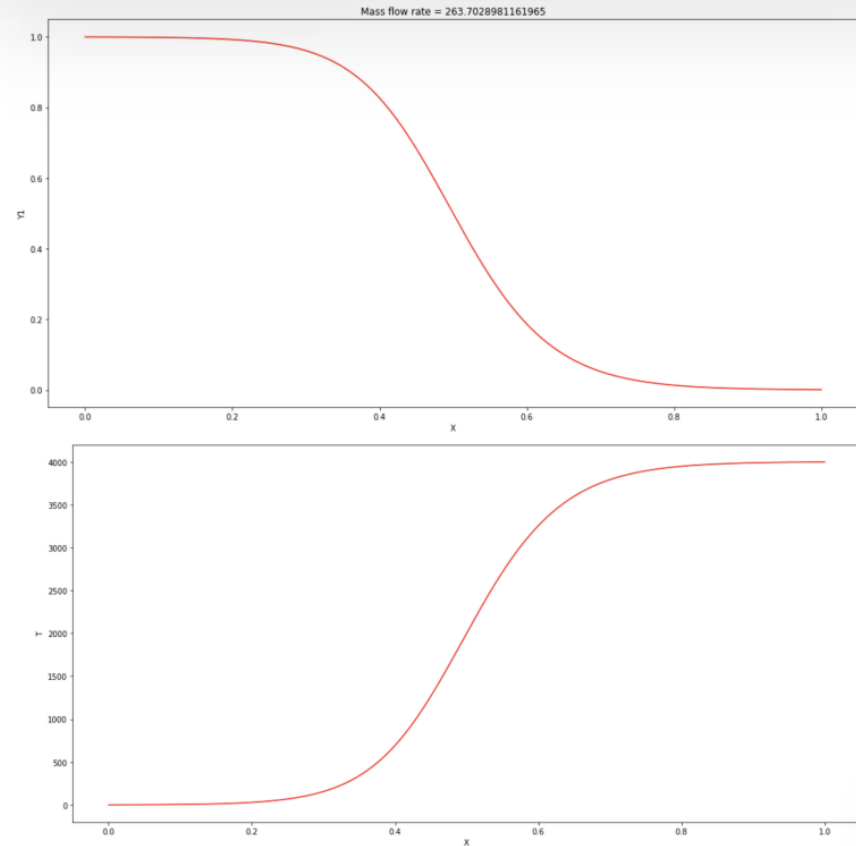
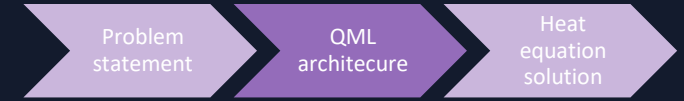


FIG. 1: Solution obtained after running the code from the Appendix. This plot is reached after 8 steps in the Newton-Raphson method, for a grid size of 256.



QML architecture : a universal Fourier series approximator

ONERA
THE FRENCH AEROSPACE CO.



Circuit used :

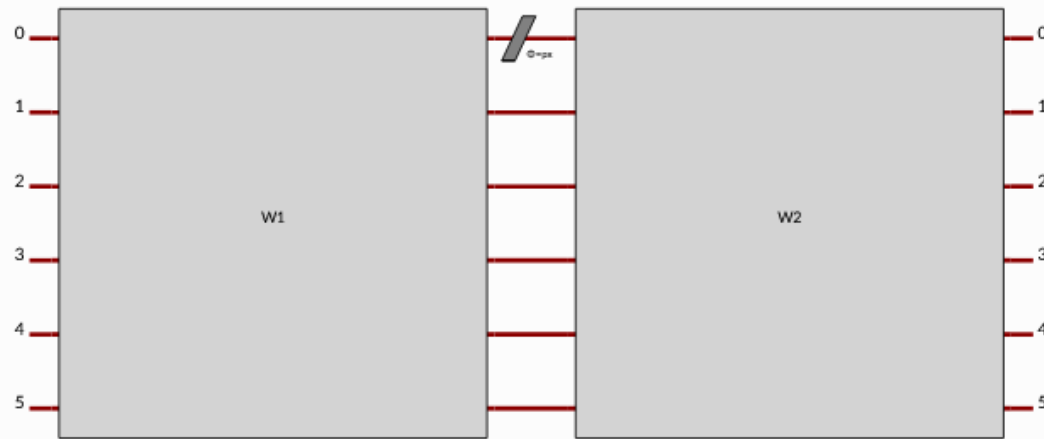


Fig. Photonic QML ansatz being a universal fourier approximator.

Vector of number of photons in each mode

$$n = (n_0, n_1, \dots, n_5)$$

Parametrized beam-splitters meshes :

$$W_1(\theta_1), W_2(\theta_2) \text{ and } \Theta = (\theta_1, \theta_2)$$

x is the input data as well as the parameter of the phase shifter.

Output :

Fourier decomposition:

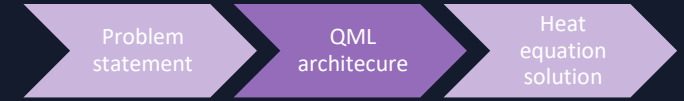
$$f_n(x, \Theta, \lambda) = \sum_{\omega \in \Omega_n}^N c_\omega(\Theta, \lambda) e^{i\omega \cdot x}$$

With $\Omega_n = \llbracket -n; n \rrbracket$ the frequency spectrum one can reach with n photons and $c_\omega(\Theta, \lambda)$ the Fourier coefficients.



ONERA
THE FRENCH AEROSPACE CO.

QML architecture : a universal Fourier series approximator to solve differential equations



Loss function for differential equation, $\frac{df}{dx} + \lambda f(x)(\kappa + \tan(\lambda x)) = 0, f(0) = f_0 :$

$$(\Theta_{opt}, \lambda_{opt}) = \underset{\Theta, \lambda}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M L\left(\frac{df_n(x_i, \Theta, \lambda)}{dx} + \lambda f_n(x_i, \Theta, \lambda)(\kappa + \tan(\lambda x)), 0\right) + \eta L(f_n(0, \Theta, \lambda), f_0)$$

With $L(a, b) = (a - b)^2$ for $(a, b) \in \mathbb{R}^2$, and a function f_n discretized on M points.

Outcome :

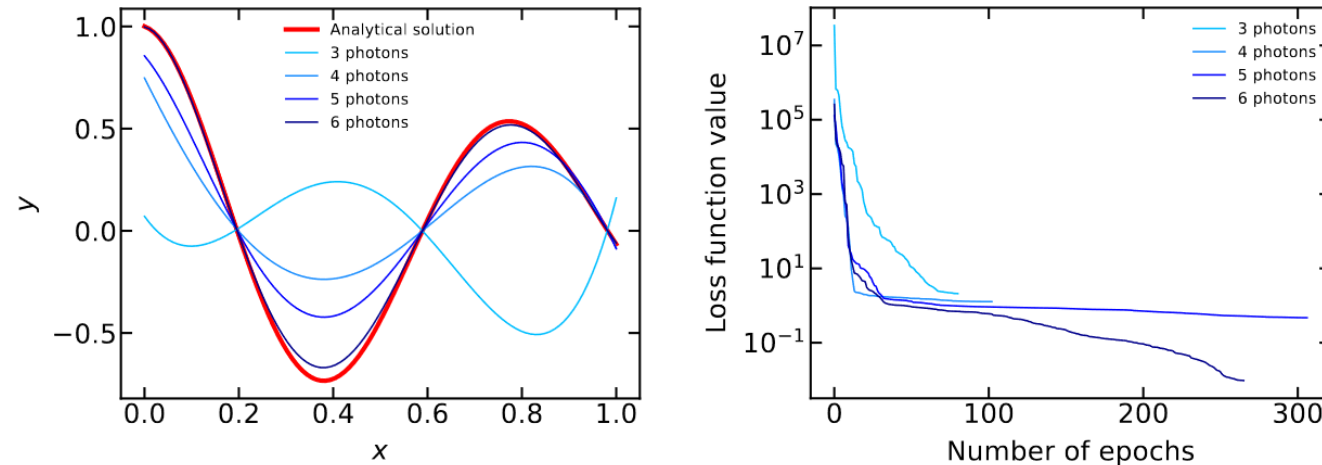
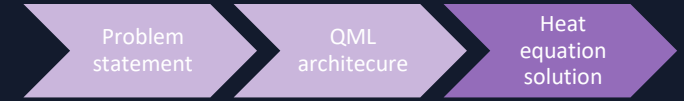


Fig. PDE resolution with a photonic QML ansatz and varying number of photons. On the left the outputted function. On the right the loss function vs number of epochs.



Resolution of heat equations using photonic QML

ONERA
THE FRENCH AEROSPACE CO.



Reply sigma solved a 2D heat equation:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right]$$

with constant boundary and initial conditions

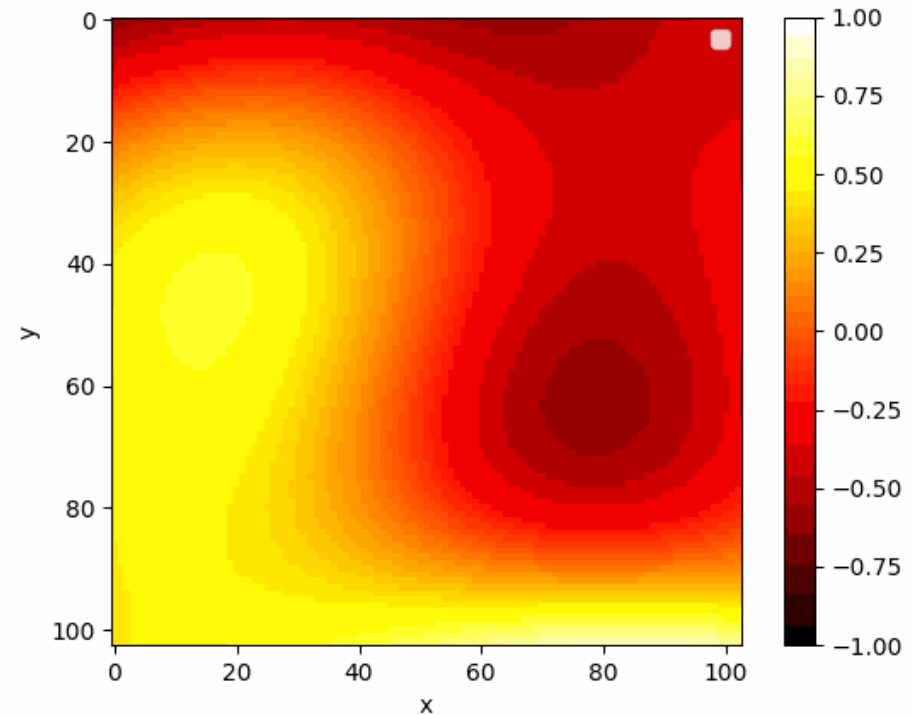


Fig. Resolution of a 2D-heat equation with photonic QML ansatz credits to Brian Ventura and Hugo Jaunin from Reply Sigma



ONERA
THE FRENCH AEROSPACE CO.

Next steps : enhancement of photonic neural network and runs on QPU

i) Enhance photonic neural networks

- Add photon number resolution
- Add data-reuploading trick

To solve the couple system of combustion reaction

ii) Runs on QPU

$$\begin{aligned}\partial_x \dot{m} &= 0 \\ \dot{m} \partial_x Y_1 - \frac{\lambda}{c_p} Le^{-1} \partial_x^2 Y_1 &= -\tilde{A} T Y_1 \\ \dot{m} \partial_x T - \frac{\lambda}{c_p} \partial_x^2 T &= \tilde{\Delta}_h \tilde{A} T Y_1,\end{aligned}$$

Fig. Coupled system of differential equations to be solved

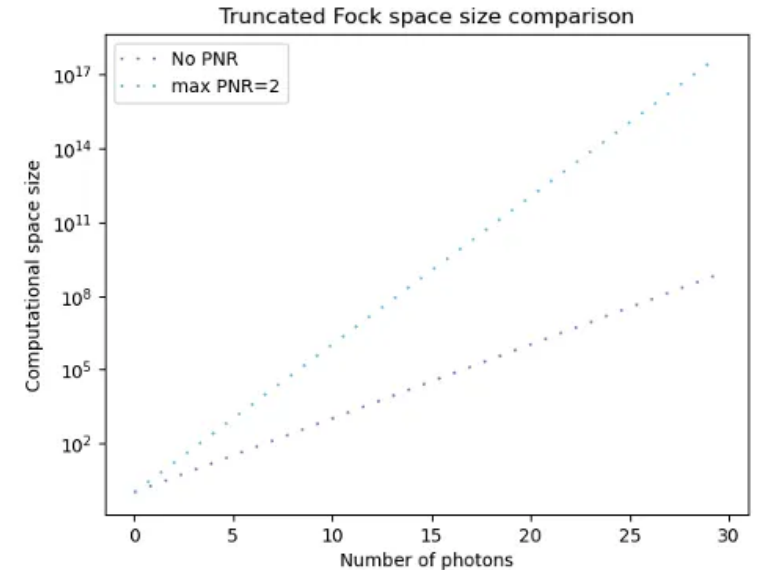
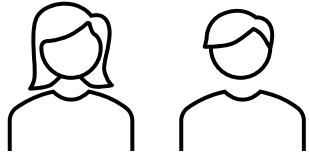


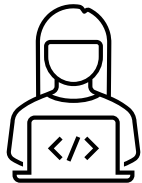
Fig. Computational space size with and without pseudo-PNR detectors



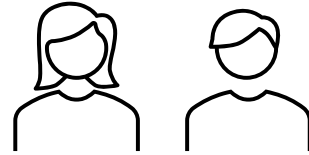
Recruitment and knowledge transfer



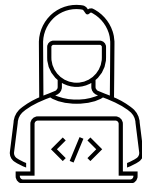
2 internships of six months recruited by ONERA for AQCMA



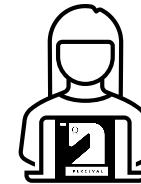
1 full-time employee to be hired on solving differential equations using Quantum Computers



2 internships of six months recruited by Quandela for AQCMA



1 application engineer working part-time on it and an expert on solving differential equations using Quantum Computers just joined the applications team



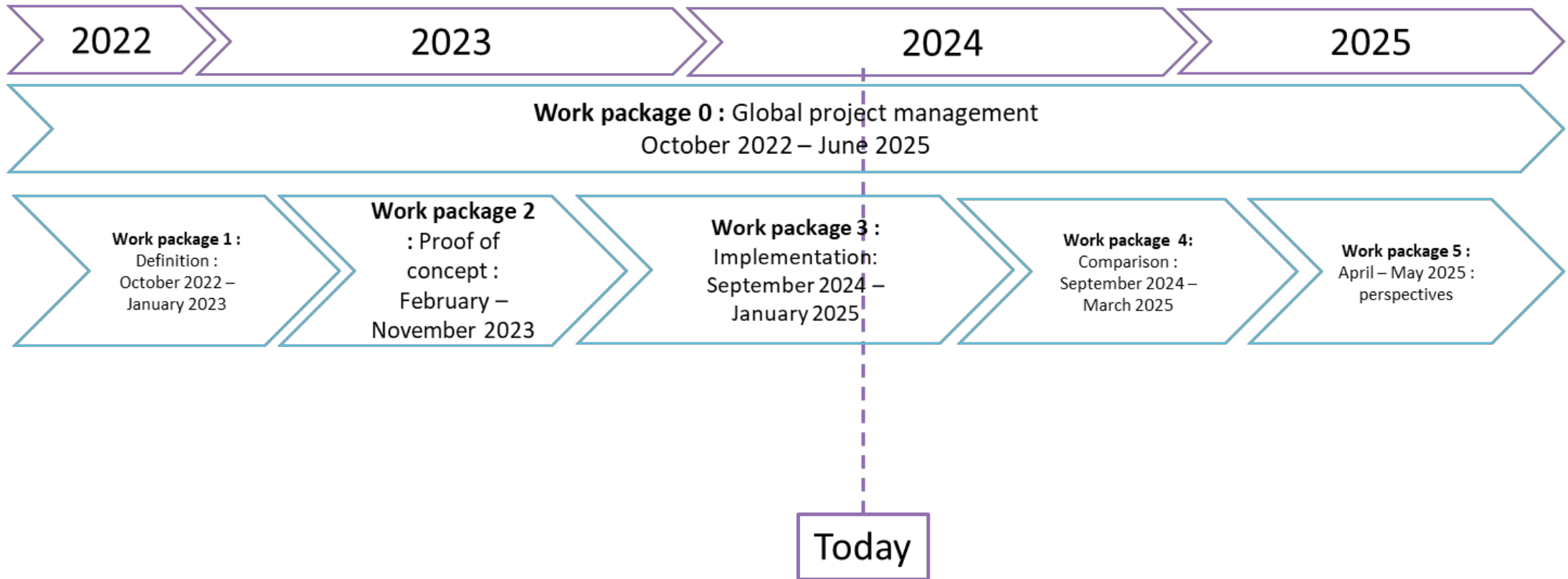
ONERA staff learned how to use Perceval



Work breakdown structure

ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB



QML-Cat

NAVAL
GROUP

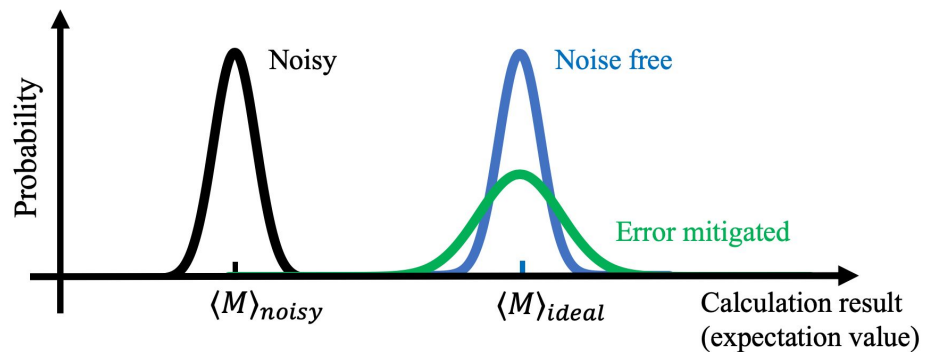
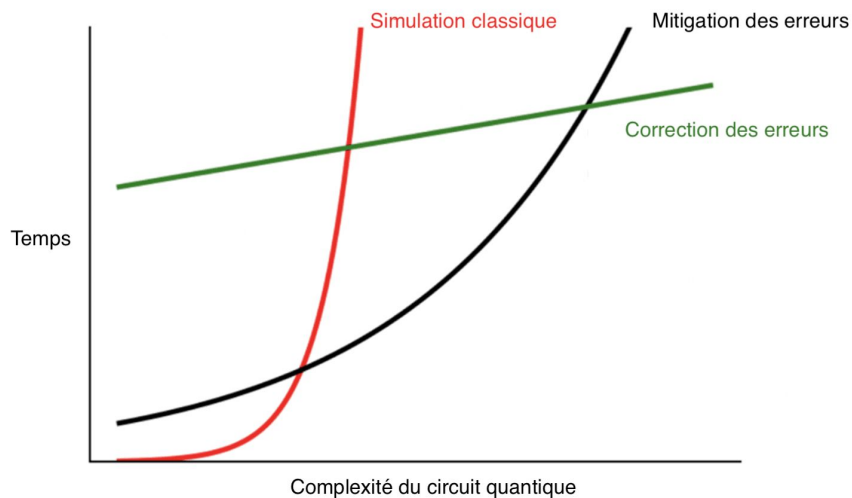
Inria



ALICE & BOB

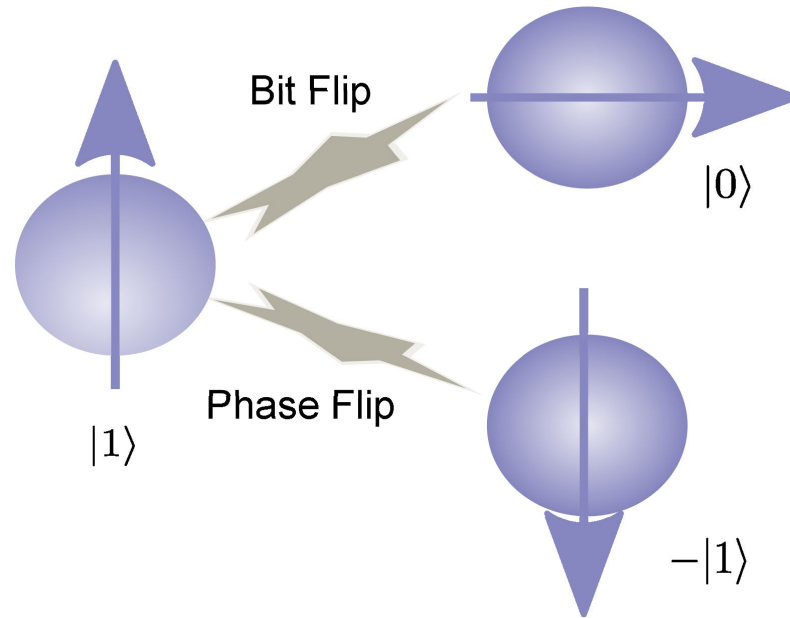
Présenté par Mathys Rennela
(ENS / INRIA)

Mitiger l'impact des erreurs



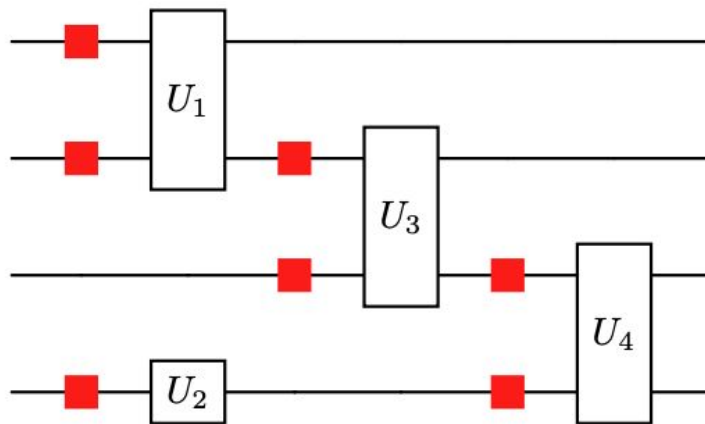
<https://arxiv.org/abs/2011.01382>

Une architecture quantique au bruit biaisé



Les qubits de chat sont naturellement protégés contre les bit flips.

Probabilistic Error Cancellation: version standard



$$\text{---} \boxed{U} \text{---} = \frac{1-p}{1-2p} \cdot \text{---} \boxed{I} \text{---} \boxed{U} \text{---} - \frac{p}{1-2p} \cdot \text{---} \boxed{Z} \text{---} \boxed{U} \text{---}$$

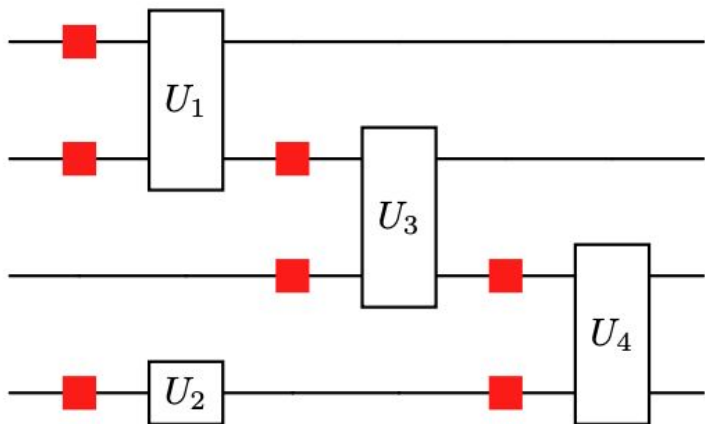
Simulation quasi-probabiliste de circuits:

1. **Échantillonner des portes bruitées** en suivant les probabilités définies par les distributions quasi-probabilistes;
2. **Exécuter le circuit formé** par les portes bruitées échantillonnées;
3. **Mesurer** le résultat.
4. Répéter S fois les étapes 1 à 3, et **calculer la moyenne** des résultats.

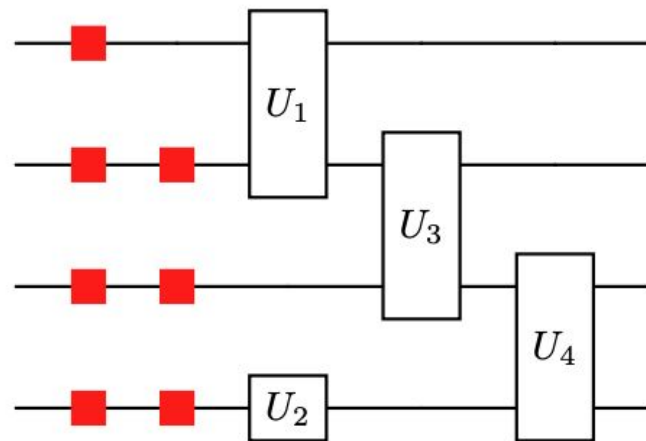
PEC garantit un résultat de bonne qualité quand S est proportionnel au carré du coût de sampling total.

Probabilistic Error Cancellation par bloc

Quand les portes du circuit préservent le bruit biaisé:

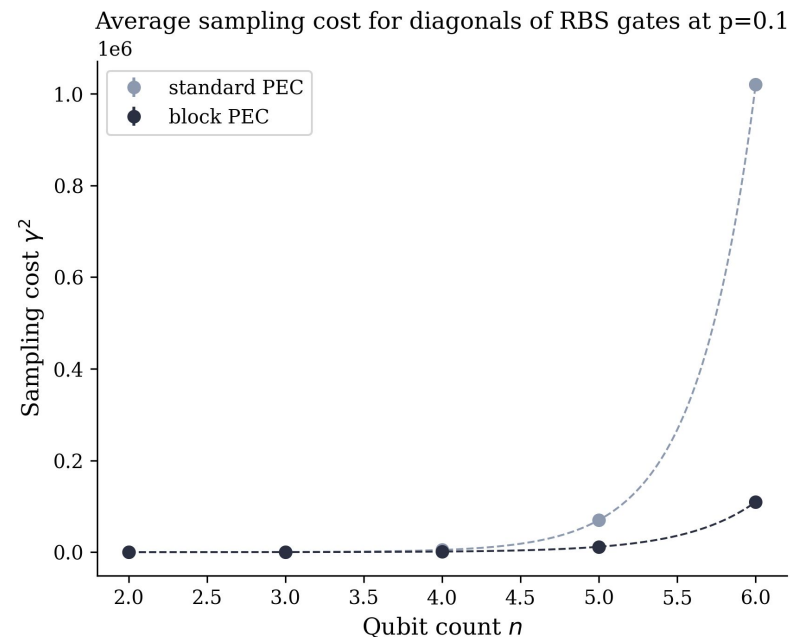
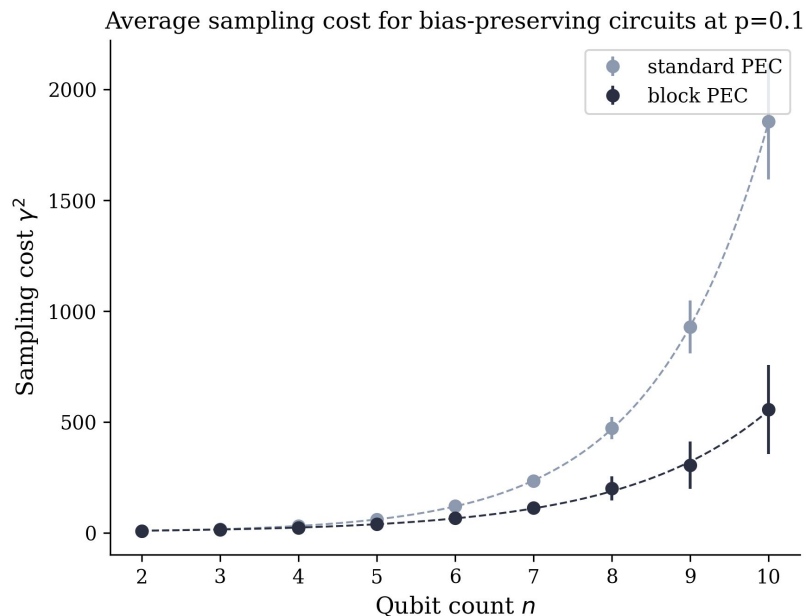


Porte par porte



Par bloc

Probabilistic Error Cancellation par bloc en pratique

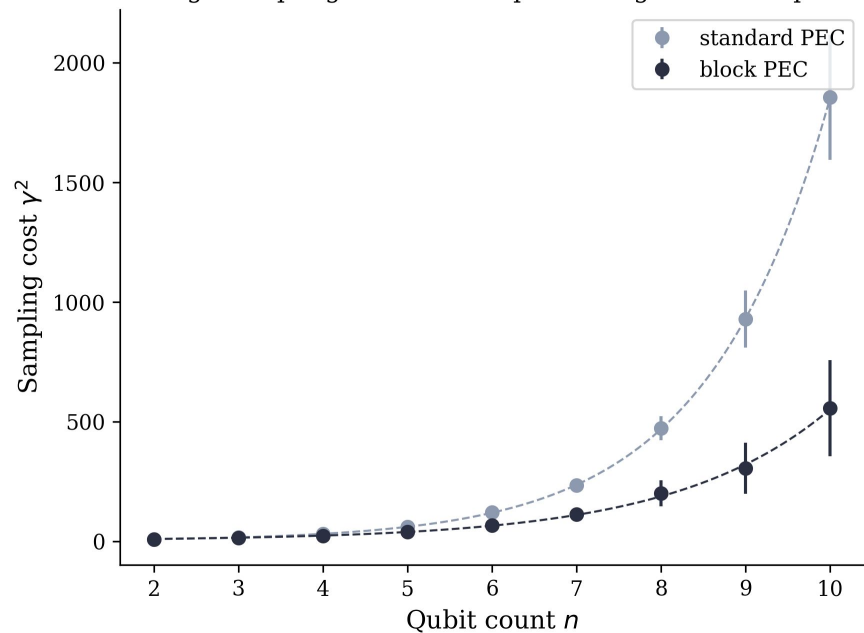


Pour des circuits de portes X, Z, CZ, CNOT, Z-rotations, ou de portes RBS (*Repeatable Beam Splitter*).

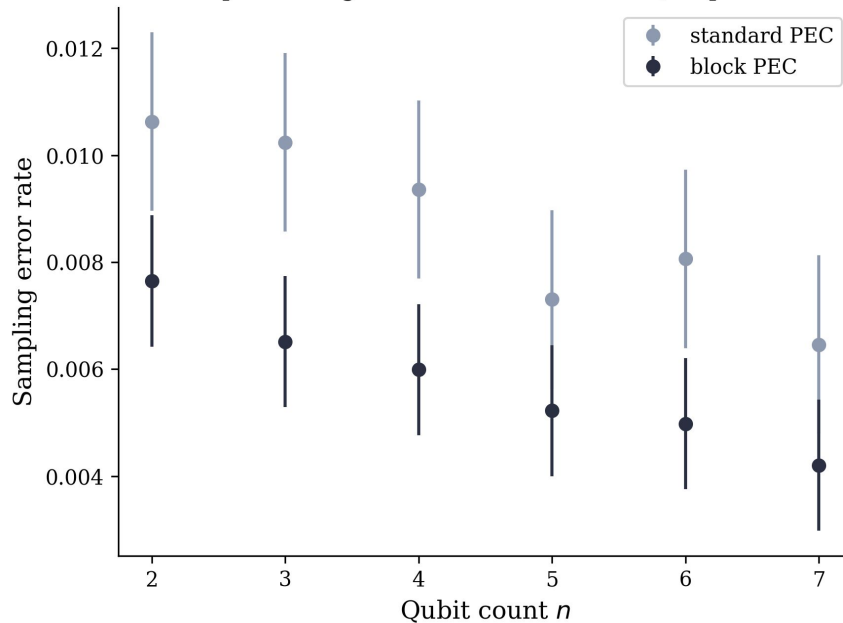
Applications: simulations stochastiques, réseaux neuronaux, création de base de données quantiques.

Application 1: circuits qui préservent le bruit biaisé

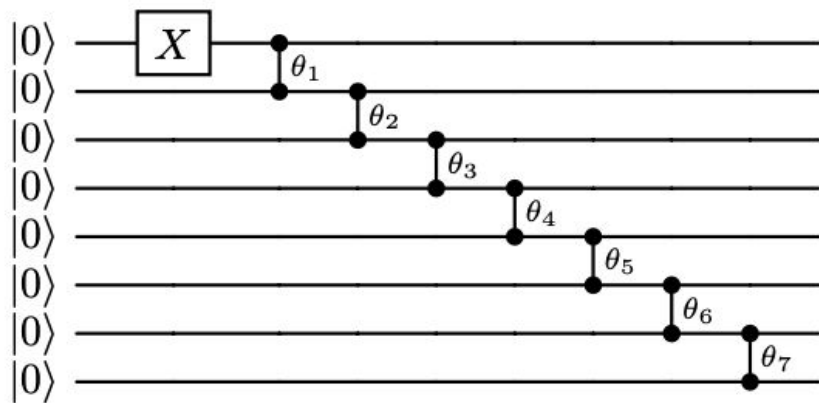
Average sampling cost for bias-preserving circuits at $p=0.1$



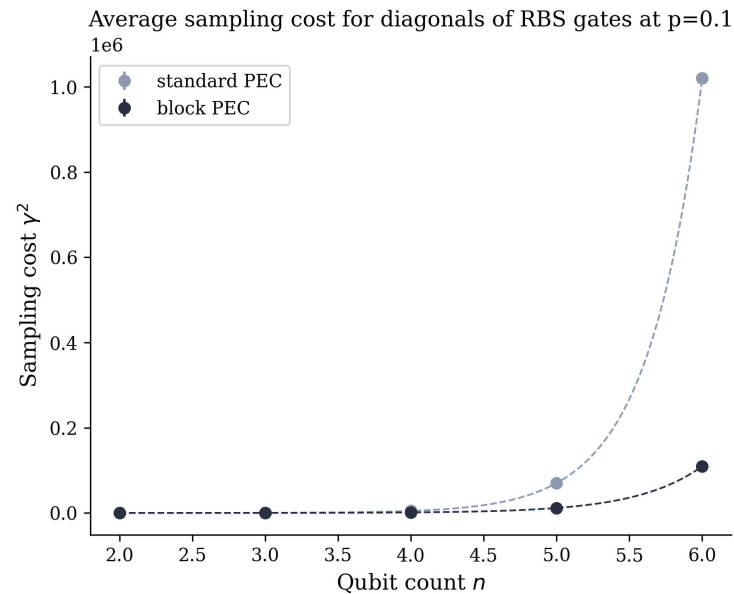
Average sampling error for bias-preserving circuits with Hadamard, at $p=0.001$



Application 2: circuits de portes RBS



Base de données à 8 points





AIRBUS

ONERA

THE FRENCH AEROSPACE LAB

Journée Pack Quantique

Projet AQUAEDP

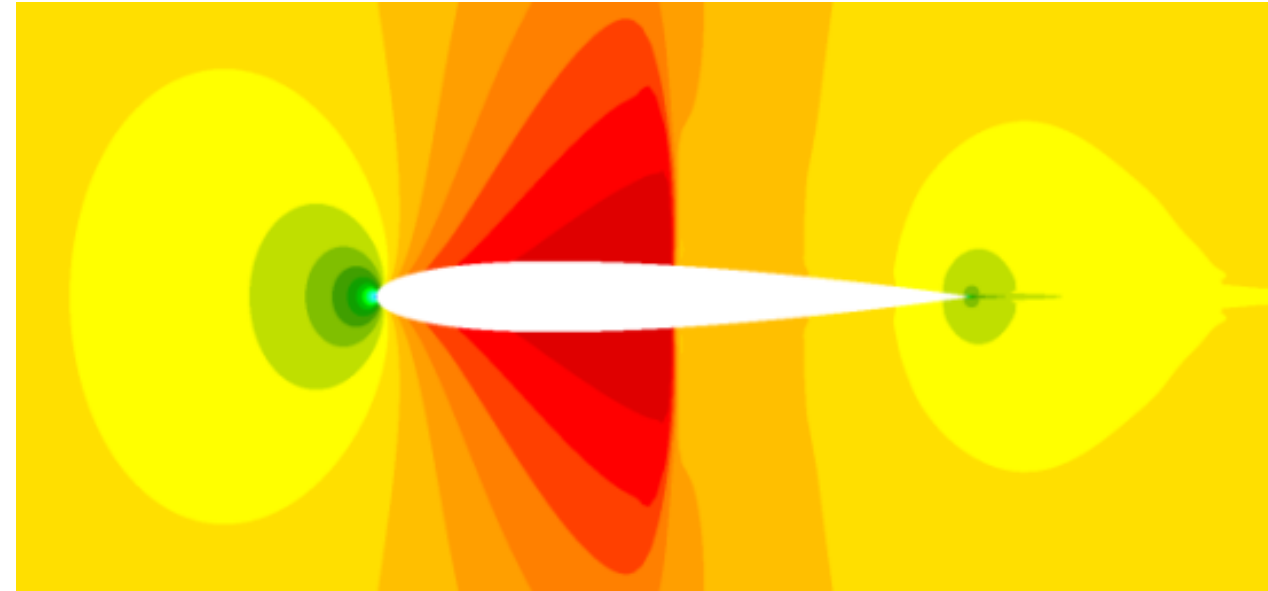
Le cas d'usage

- Des **calculs de type CFD** (Computational Fluid Dynamics) permettent de décrire le mouvement de l'air autour d'un aéronef et de déterminer des forces aérodynamiques qui agissent sur ses surfaces
- Il s'agit **des calculs intenses et très coûteux**, correspondant à 80% de la capacité de Calcul Haute Performance chez Airbus (en heure machine)
- Envisager des algorithmes hybrides (quantique – classique) afin de réduire de temps de traitement



Le cas d'usage

- On se focalise au régime transsonique autour du profil aérodynamique NACA 0012
- Durant le vol, l'écoulement d'air autour des ailes de l'aéronef passe du régime subsonique au régime transsonique
- Ceci entraîne un choc de recompression, caractérisé par une augmentation importante de la pression sur l'aile



Profil aérodynamique NACA 0012 en régime transsonique

Le problème mathématique derrière

En route vers Navier-Stokes -> les équations de Burgers (cas de 0 viscosité)

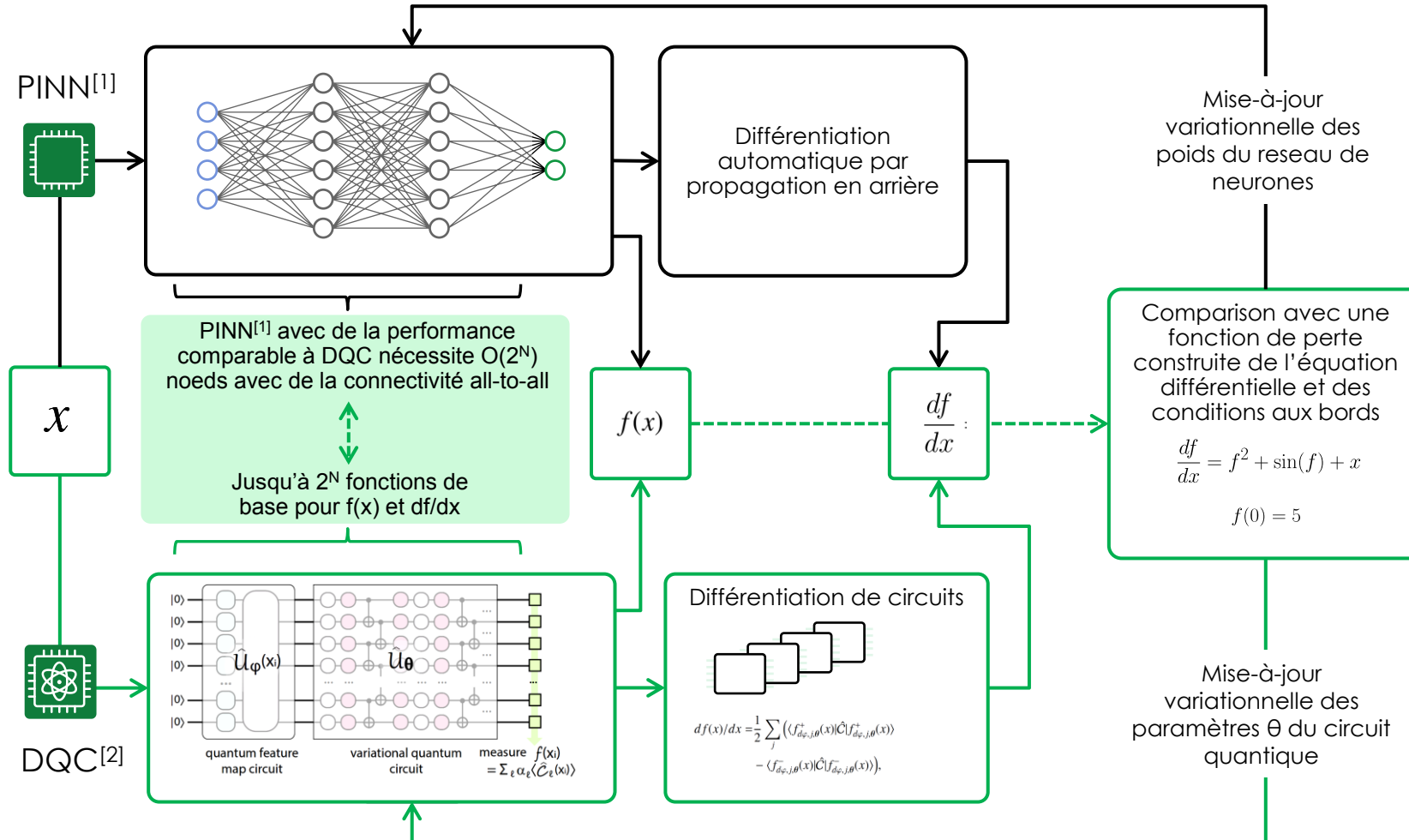
$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} + u(t, x) \frac{\partial u(t, x)}{\partial x} = 0 \quad \text{for } (t, x) \in [0, T] \times [0, 1]. \quad (7)$$

Dans ce cas on a

$$u(0, x) = \exp\left(-\frac{(x-b)^2}{2c^2}\right) \quad \text{for } x \in (0, 1), \quad (8)$$

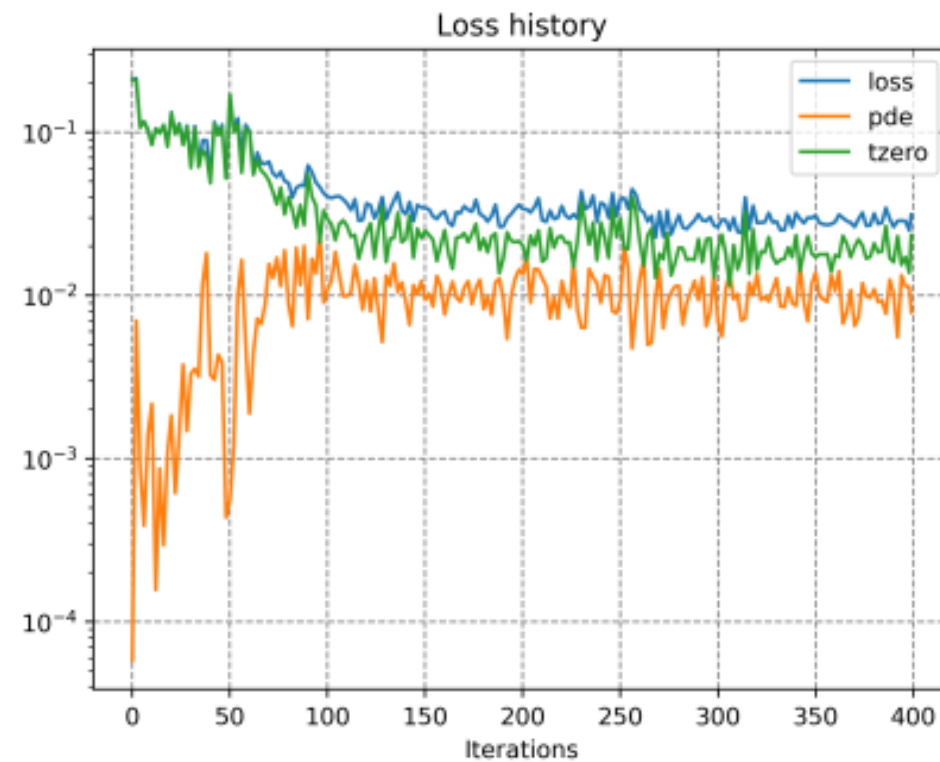
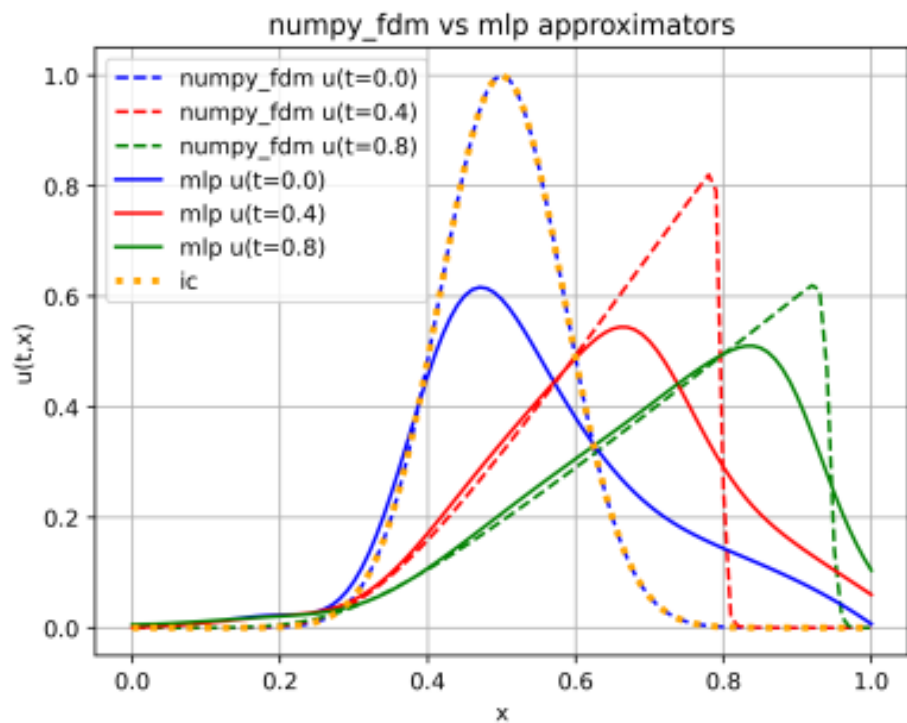
$$u(0, 0) = u(0, 1) = 0, \quad (9)$$

La solution algorithmique

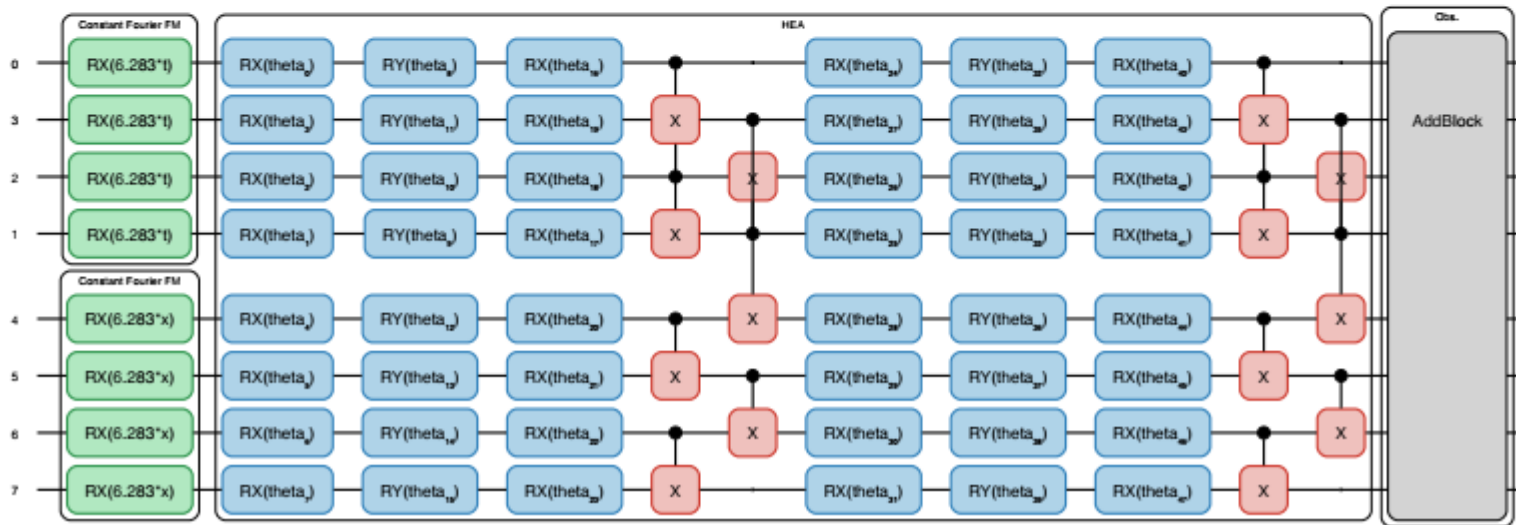
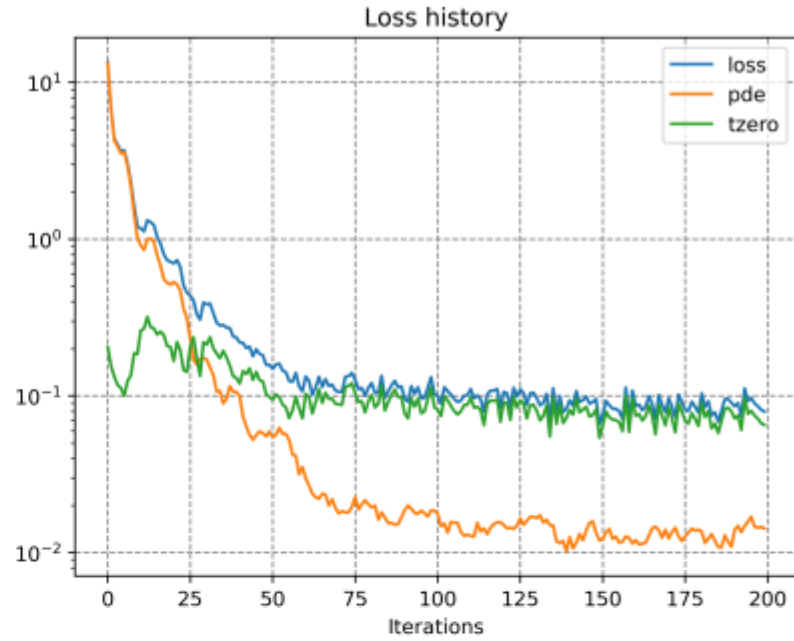
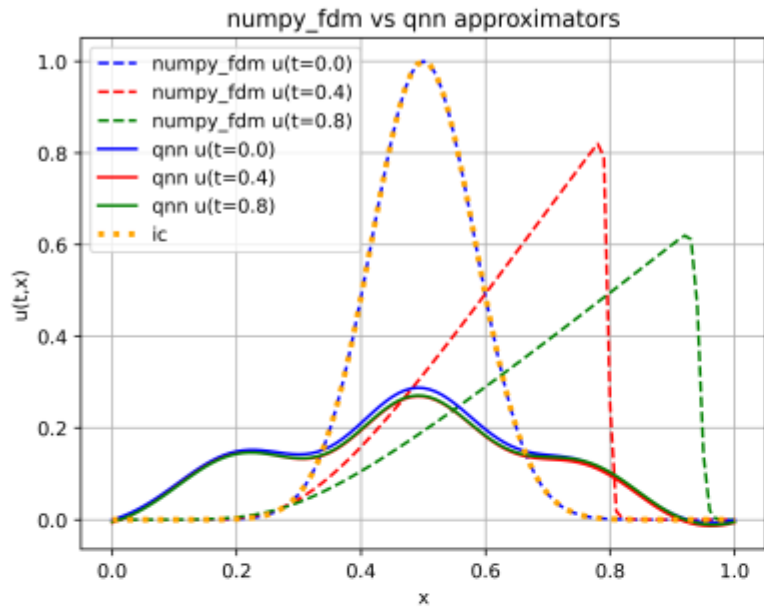


1: PINN = Physics Informed Neural Network
 2: DOI:10.1103/PhysRevA.103.052416

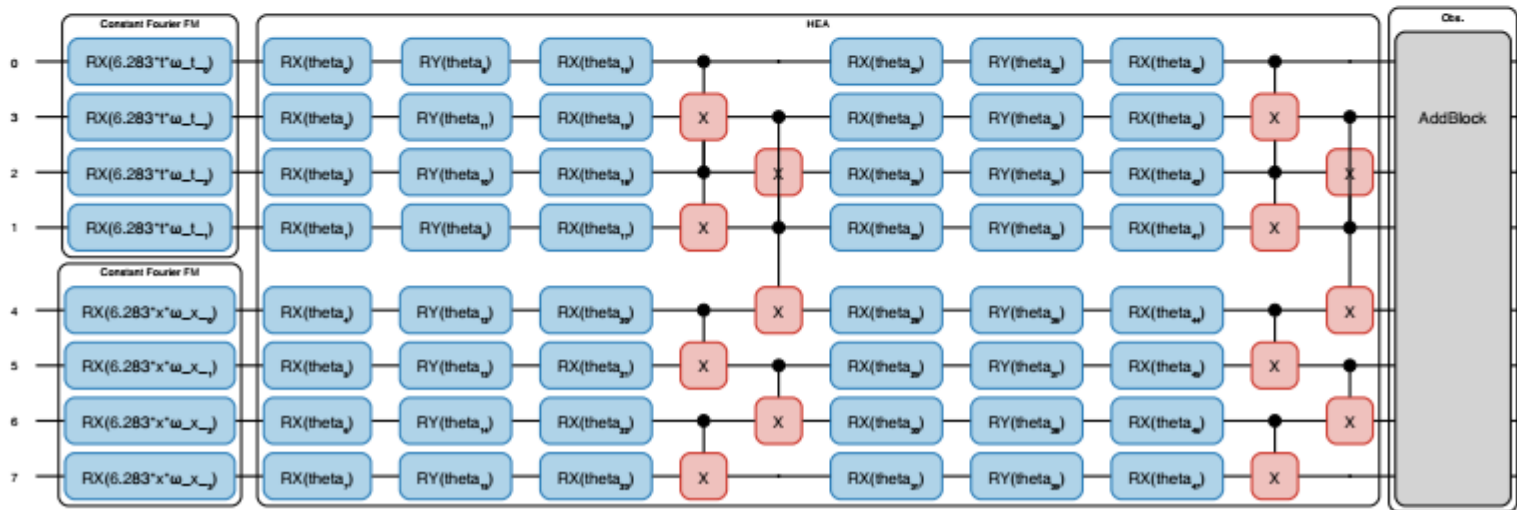
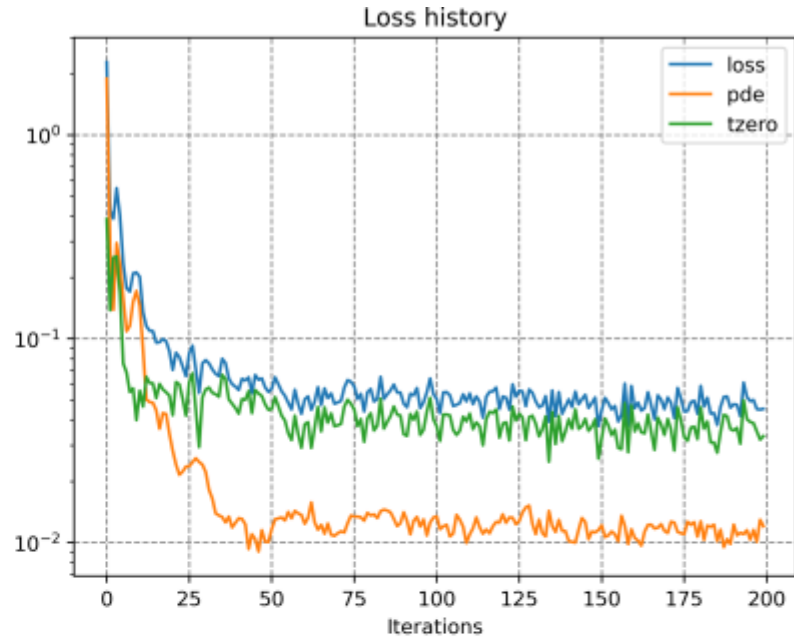
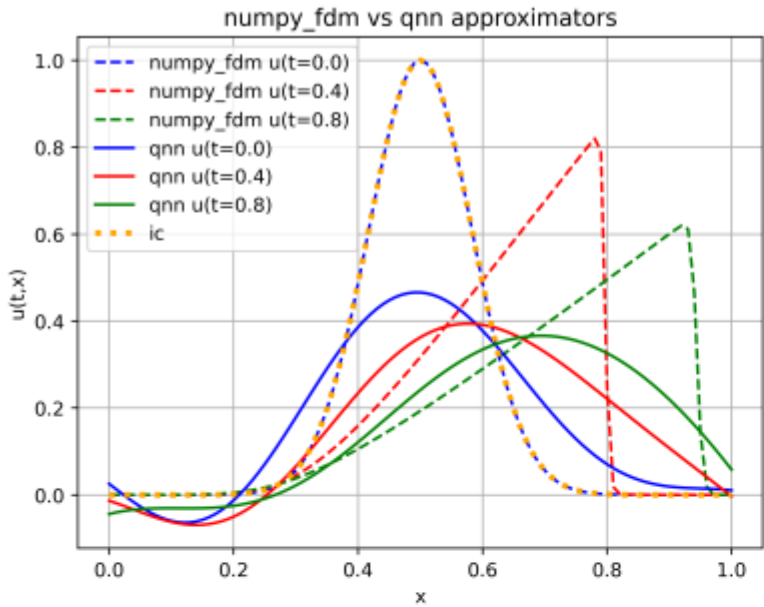
Quelques résultats



Quelques résultats

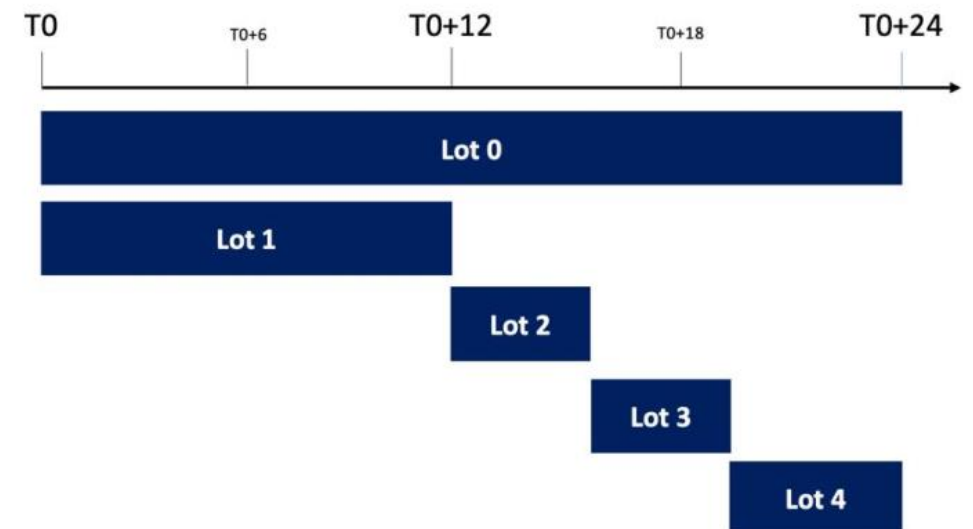


Quelques résultats

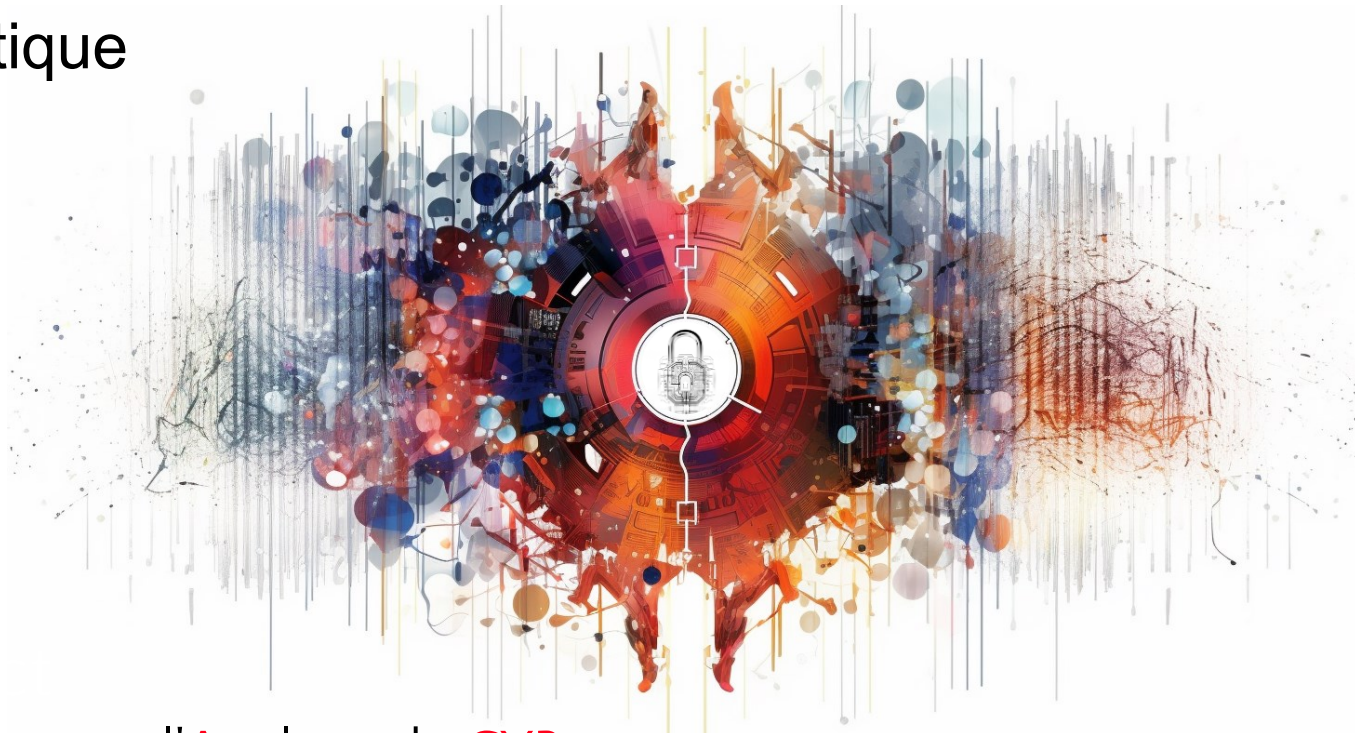


Prochains étapes

- Le projet commence à entrer dans sa phase 2
 - Un point de focus sera l'amélioration de la qualité des résultats
 - Ceci sera suivi par l'analyse du système plus proche de la dynamique transsonique cible
- Un point important c'est le côté benchmarking avec les partenaires industriels pour avoir des solutions classiques à point comme référence



Projet Pack Quantique



AQACYB

Avantage Quantique pour l'Analyse de Cybermenaces

Quantum Advantage for Cyber Threats Analysis

Proposé par



IQM

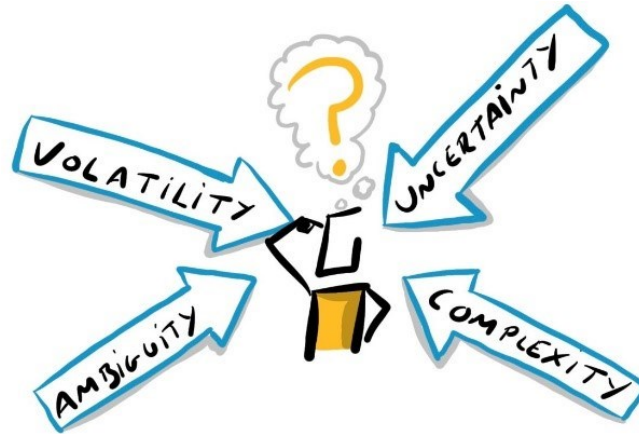


Avec l'accompagnement du



CYBERSECURITY

In today's VUCA world (Volatility, Uncertainty, Complexity, Ambiguity), cybersecurity is essential for states, citizens, and companies.



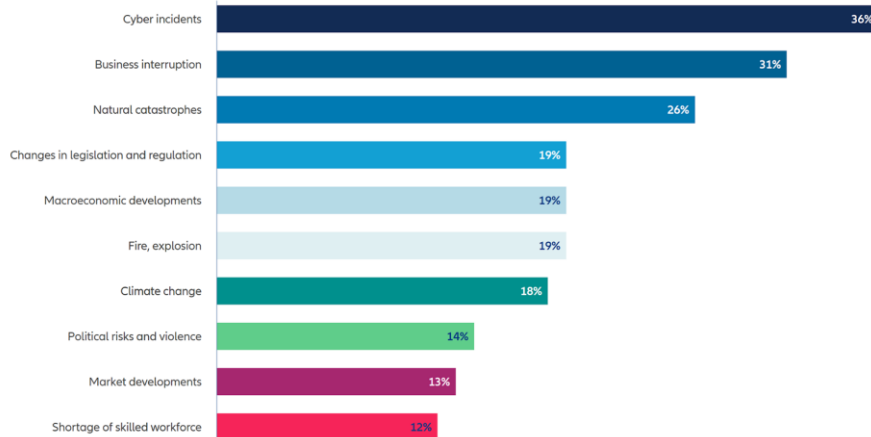
CYBERSECURITY - The Most Important Business risk



The most important business risks in 2024: global

Allianz Risk Barometer 2024

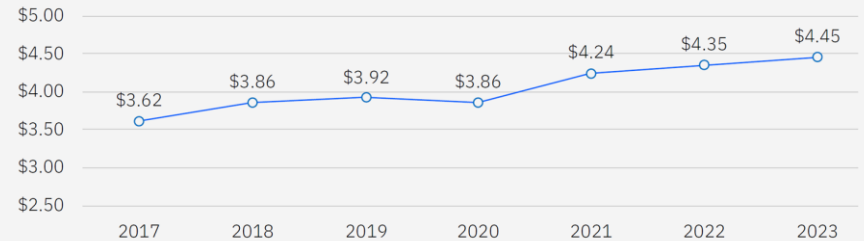
Figures represent how often a risk was selected as a percentage of all survey responses from 3,069 respondents. All respondents could select up to three risks per industry, which is why the figures do not add up to 100%.



Source : Allianz Risk Barometer 2024

Total cost of a data breach

million



Investing now can save millions

USD 4.45 million

The global average cost of a data breach in 2023 was USD 4.45 million, a 15% increase over 3 years.

51%
51% of organizations are planning to increase security investments as a result of a breach, including incident response (IR) planning and testing, employee training, and threat detection and response tools.

USD 1.76 million

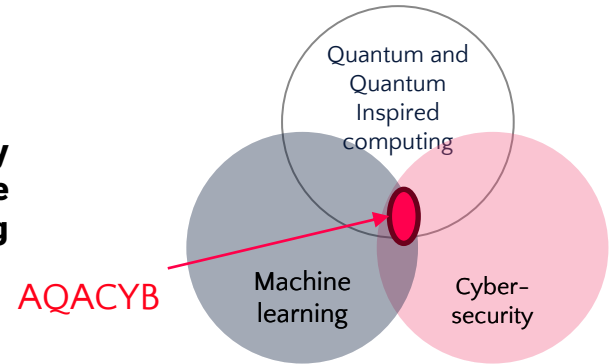
The average savings for organizations that use security AI and automation extensively is USD 1.76 million compared to organizations that don't.

Source : IBM Security Report 2023

PROJECT OBJECTIVE

Allianz, an insurance company, recognizes the importance of cybersecurity and is leveraging AI to prevent cyber threats. As part of this effort, they are exploring the potential benefits of quantum algorithms in improving cybersecurity threat detection.

Develop a product for threats detection in cybersecurity. Based on an AI model leveraging quantum and MULTIVERSE quantum-inspired algorithms applied in IQM QPU.



AQACYB 3 PARTNERS - 1 AIM



Allianz 

Global player and European leader in insurance



IQM *France*

Pan-European leader in the construction of quantum computers



MULTIVERSE

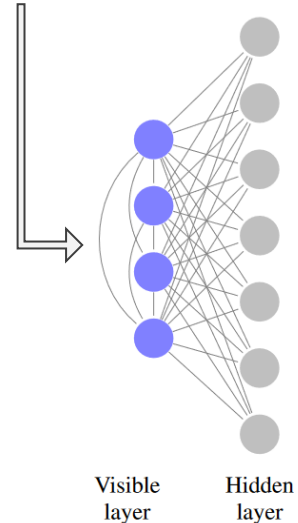
European leader in the development of quantum and quantum-inspired software

RELATED WORKS

Despite project time lag, AQACYB partners have been involved in other cyber projects e.g. Allianz and LMU explored unsupervised anomaly detection with *quantum Boltzmann machines*.

- EDR inspired synthetic dataset.
- Quantum Annealing based implementation.

Results: QBMs can outperform classical models (training steps and result quality).
Still not achieved with current QPUs.



Exploring Unsupervised Anomaly Detection with Quantum Boltzmann Machines in Fraud Detection

Janus Sica¹, Daniel Schumann², Magdalena Borkan³, Thomas Helger⁴, Wajid Saifi¹, Michael Kitz⁵, Jozsef Nefzinger⁶, Leo Siska⁷, Oliver Schölkopf⁸ and Claudia Lindorff-Poppe⁹
¹Allianz Finance
²LMU Munich, Germany
³Allianz Finance
⁴janus.sica@allianz.com

Keywords: Quantum Boltzmann Machines, Quantum Annealing, Anomaly Detection

Abstract: Anomaly detection in Fraud Detection and Response (EDR) is a critical task in cybersecurity programs of large companies. With rapidly growing amounts of data and the emergence of zero-day attacks, manual and rule-based detection techniques are no longer enough to protect. While classical machine learning approaches in this problem exist, they frequently show unsatisfactory performance in differentiating malicious from legitimate activities, a pressing concern to state agencies. Generalization from currently employed machine learning techniques on quantum generative models. Allowing for the largest representation of data in available quantum hardware, we investigate Quantum Annealing based Quantum Boltzmann Machines (QBMs) for the given problem. We compare the new fully unsupervised approach for the problem of anomaly detection using QBMs and compare its performance to an EDR inspired generative Adversary. Our results indicate that QBMs can outperform their classical analogs. In combination with the adversarial model, we can detect anomalies and training steps in special cases. When exploring Quantum Annealing from D-Wave Systems, we conclude that other more generic classical simulators or alternative more QPU time is needed to conduct the necessary hyperparameter optimization allowing to replicate our simulation results on quantum hardware.

1 INTRODUCTION

Anomaly detection is the identification of abnormal behavior in data, which manifests in individual data points that differ significantly from the majority of the data (Chandola, El, 2008). This task frequently appears in many domains including finance, healthcare and cybersecurity (Alcázar et al., 2012; Spitzer et al., 2018; Kitzler, 2019), particularly challenging application of Anomaly Detection can be found in Fraud Detection and Response (EDR), which aims at detecting and investigating suspicious activities on endpoints such as mobile phones or workstations in cybersecurity (Katz et al., 2015). In practice, the respective networks can be composed of billions of nodes, generating an immense amount of data, which the search for extremely rare, malicious anomalies can be very tedious.

This vast number of typically high-dimensional data points and additional impediments such as irregular attack rates demand for suitable anomaly detection techniques deviating from the well widely-used manual and rule-based approaches. While many

classical machine learning approaches to this mostly unsupervised learning problem exist, (e.g. clustering (Mannard et al., 2015), autoencoders (Falk et al., 2017, 2019) or Bayesian networks (Kleinow et al., 2016)), the distinction between malicious and benign activities frequently remains unclear due to manual observations on a track-of-hackers, detecting or simulating the number of false positives, the available data and failing to reliably detect all true positives (i.e., the detection threshold).

In search for alternative approaches that can cope with the exponential real world data sizes, we investigate the application of Quantum Computing (QC) to this problem, as QC has shown promising performance in generative data modeling, which is a popular technique used in unsupervised anomaly detection (Zhu et al., 2022). The general motivation behind using generative models for unsupervised anomaly detection is that their core functionality of replicating a given data distribution yields a data model that closely represents the input dataset with the exclusion of all anomalies, as they are not seen in the learned

RELATED WORKS

Despite project time lag, AQACYB partners have been involved in other cyber projects e.g. Multiverse has developed solution with quantum-inspired solutions (TN) and Qboost.

Tensor Networks for Explainable Machine Learning in Cybersecurity

Borja Aizpurua,^{1,2} Samuel Palmer,³ and Román Orús^{1,4,5}

¹Multiverse Computing, Paseo de Miramón 170, E-20014 San Sebastián, Spain

²Department of Basic Sciences, Tecnun - University of Navarra, E-20018 San Sebastián, Spain

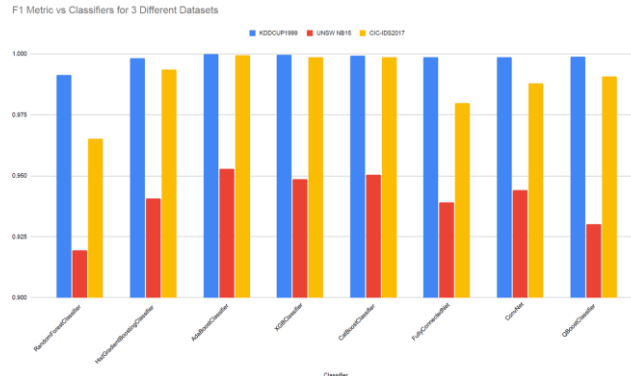
³Multiverse Computing, Spadina Ave., Toronto, ON M5T 2C2, Canada

⁴Donostia International Physics Center, Paseo Manuel de Lardizabal 1, E-20018 San Sebastián, Spain

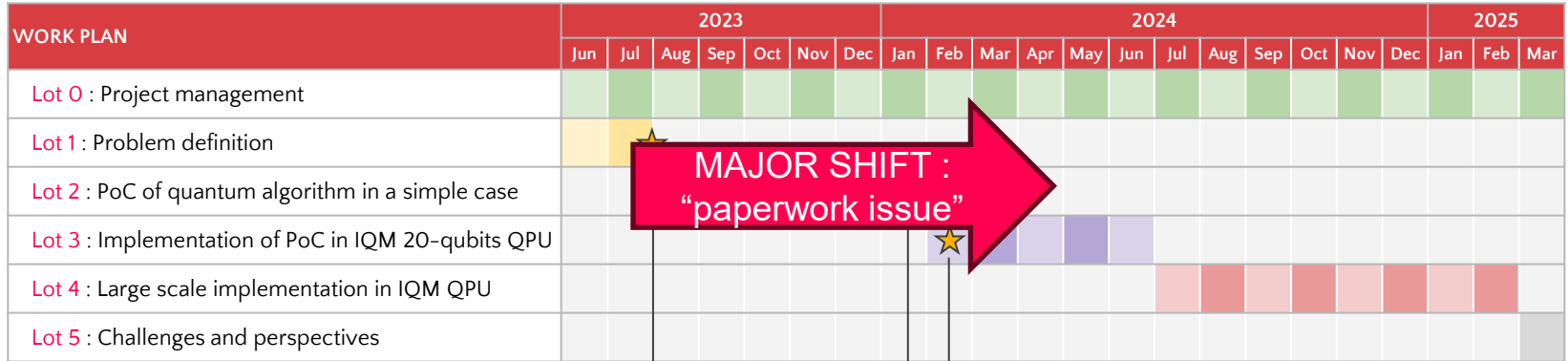
⁵IkE



In this p
algorithms.
States (MF
Our investi
GANs in t
naturally f
tual inform
unprece
rationale b



TIMELINE OVERVIEW



MAJOR SHIFT :
 “paperwork issue”

Use-case selection

IQM 20 qubits available

Model working

Lot 0
 Coordination
 planification of the
 project

All project long

Lot 1
 Analysis, definition
 and selection of use-
 cases. Literature
 review, data
 preparation and
 algorithm selection

2 months

Lot 2
 Development of
 selected algorithms.
 Adaptation to IQM
 hardware (co-
 design). Use of IQM
 simulator

6 months

Lot 3
 Implementation in
 IQM 20-qubits QPU.
 Reduced dataset
 comparison and full
 scale analysis

5 months

Lot 4
 Full scale
 implementation in
 IQM machine.
 Benchmarks against
 Allianz current
 solution.

8 months

Lot 5
 Bottlenecks
 identification.
 Deployment and
 integration analysis.

1 month

NEXT STEP

Allianz red team is building a specific dataset

Accordingly envisaged approaches, quantum machine learning models, will highly depend on the problem type **unsupervised vs supervised**, the **data quality** and the different attributes of the dataset (**imbalance, size, etc.**):

	Classical (Benchmarking)	Quantum and Quantum-Inspired
Supervised	Random Forest & Boosting methods. Additionally, fully connected neural networks (FCNN) and convolutional neural networks (CNN)..	QBoost, quantum neural networks, VQA, etc
Unsupervised	DBSCAN, SVM, Variational Autoencoders, Isolation Forest, GAN.	TN-based GM

→ Approach will depend also on what we can do with the IQM QPU, the IQM simulator and the **superconducting quantum circuits** (e.g. adaptation of Allianz & LMU work on IQM QPU).

→ The exploration of highly innovative approaches could also potentially surpass the methods described above.



Thank you !

Projet Pack Quantique



GAUPRO

Portfolio risk assessment
GAUssian PROcesses

Proposé par



Avec l'accompagnement du



Le calcul intensif au service de la connaissance



GAUPRO PARTNERS



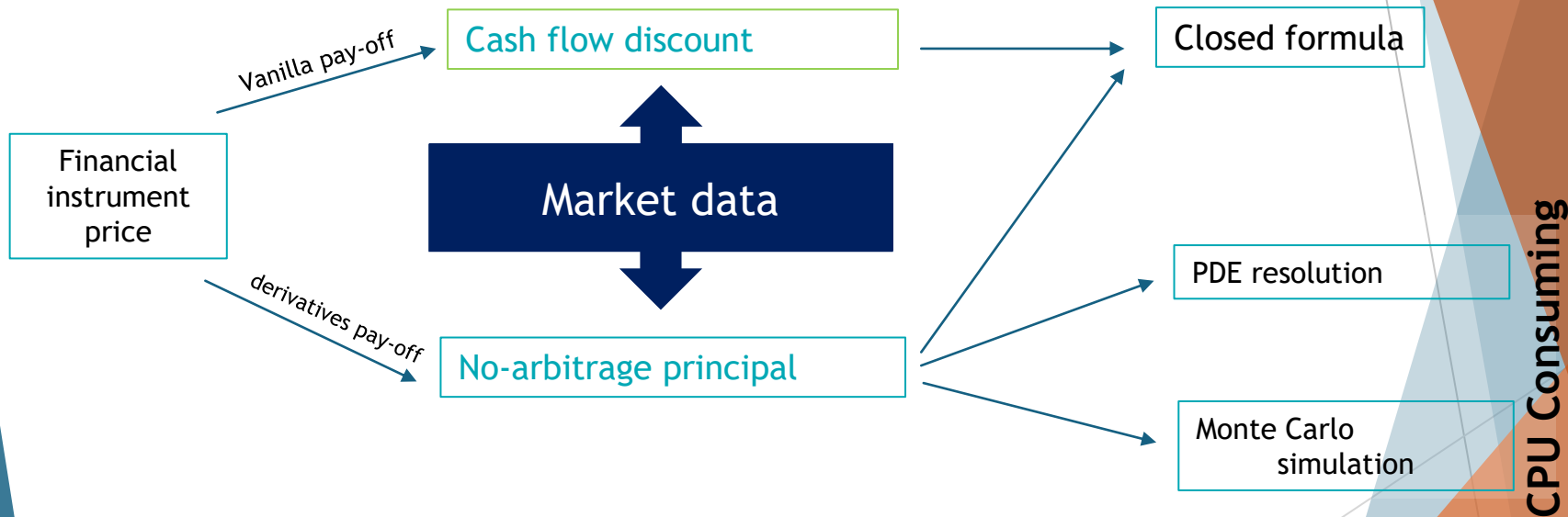
Natixis CIB is a subsidiary of Groupe BPCE, France's second-largest banking group, and acts as the group's investment, corporate, insurance and financial services bank. Natixis provides services in three main areas: retail banking, asset & wealth management and insurance.



European leader in the development of quantum and quantum-inspired software

Pricing of Financial pay-off

► Overview of pricing methods



With the no-arbitrage principal the model may consume a lot of CPU (greater than 1s)

Risk measures

► Different type of risk measures

The pricing model are used for theses principals risk measures

Sensitivities

Are the responsiveness to changes in external factors, such as interest rates, market conditions, or other relevant variables. It measures the degree to which the product's value or performance is influenced by changes in these factors

Value at risk (VaR)

is a statistical measure used to quantify the level of financial risk within a firm or a portfolio over a specific time frame. It represents the maximum potential loss.

Counterparty Credit Risk

Is the risk that a counterparty in a financial transaction will default on its obligations. This risk arises in various financial transactions, such as derivatives, loans, and other forms of credit exposure. Financial institutions and market participants assess and manage counterparty credit risk to minimize potential losses and ensure the stability of their operations.

Stress test

Is a simulation or analysis conducted to evaluate the potential impact of adverse events or market shocks on a financial institution, investment portfolio,

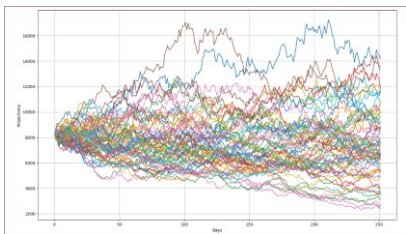
These measures call for an instruments several times the pricer.

- **Example:** 1000 calls of a pricer with 30s response time need almost ~8H

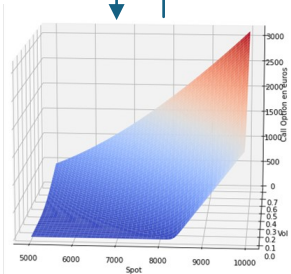
Risk measures

► GPR in a nutshell

Full pricing



Market data context



Pricing model

Multiple call of the pricing function of the pay-off (CPU consuming)



Transformation

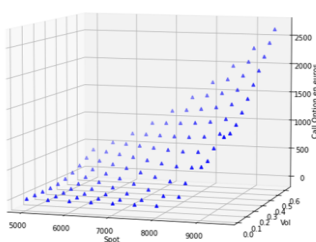


Idea: Replace the price function by another function calibrated minimising some error. The procedure consists in two phases:

Offline phase: Parameters calibration using some input data.

Online phase: Regression evaluation in input data possibly different from the ones used in the calibration.

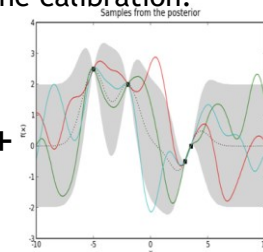
sampling



Choose an optimal sampling of the price function

Construction of a cube with a sample of price

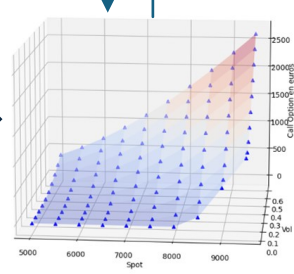
+



Calibrate a Gaussian regression process on the sample

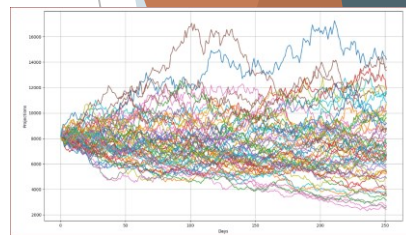
Construction of a cube with a sample of price

smoothing



Multiple call of the interpolated price function based on a GPR ($<<0,5s$)

Alternative pricing



This approach has a high dimensionality on classical computer but seem a way to improve the risk measure

Related Work

Market Risk Assessment of a trading book using Statistical and Machine Learning

Noureddine Lehdili, Pascal Oswald and Harold Gueneau (*)

Natixis, Enterprise Risk Management Market and Counterparty Risk Modelling, 30, avenue Pierre Mendes-France, 75013 Paris. (*) AIYO - 3, Rue Bellini, 92800 Puteaux
Emails : noureddine.lehdili@natixis.com ; pascal.oswald@natixis.com ; harold.gueneau@aiyo.fr

Abstract

Machine Learning algorithms have received a lot of interest in recent years thanks to the recent increases in computing power coupled with the availability and quantity of data in business applications ([1], [2]). In this field, many solutions have already implemented and many more being studied and explored (cf. [3], [4], [5], [6]). In finance, these algorithms are deployed for many applications ([7], [8], [9], [10]) as pricing, fraud detection, credit scoring, portfolio management, etc. In the same time, a recent study ([11]) outlines that even if several applications of machine learning dedicated to the risk management in banks and financial institutions such as credit risk, market risk, operational risk and liquidity risk has been explored, many areas in financial risk management that could significantly benefit from the power of machine learning techniques to address specific problems. Based on this observation and the fact that recently the internal models of banks are questioned by regulators (TRIM¹, FRTB²) that request to upgrade and to improve the underlying quantitative risk methodologies and to implement others new quantitative rules (FRTB), we are interested in how machine learning algorithms can help banks to complete the probate process of their internal models used to compute the regulatory capital. To address this question, it worth to focus on the more challenging aspect of market risk measurement task such as the practical implementation of the value-at-risk and the expected shortfall models of the trading portfolio of the bank. Given the important number of risk factors behind the trading portfolio, these risk models are implemented using several proxies and simplistic assumptions for the performance purposes. These limitations are largely due to the valuation models that cannot in general directly used to revalue all derivatives instruments in all simulation's scenarios since they are more time consuming. It is therefore quite legitimate to wonder whether it exists a robust machine learning algorithm able to repeatedly value a reasonable computing time a large portfolio of derivatives instruments. The recent research indicates that the answer is yes, and the Bayesian Gaussian processes could be the appropriate tool when the problem is well-formulated.

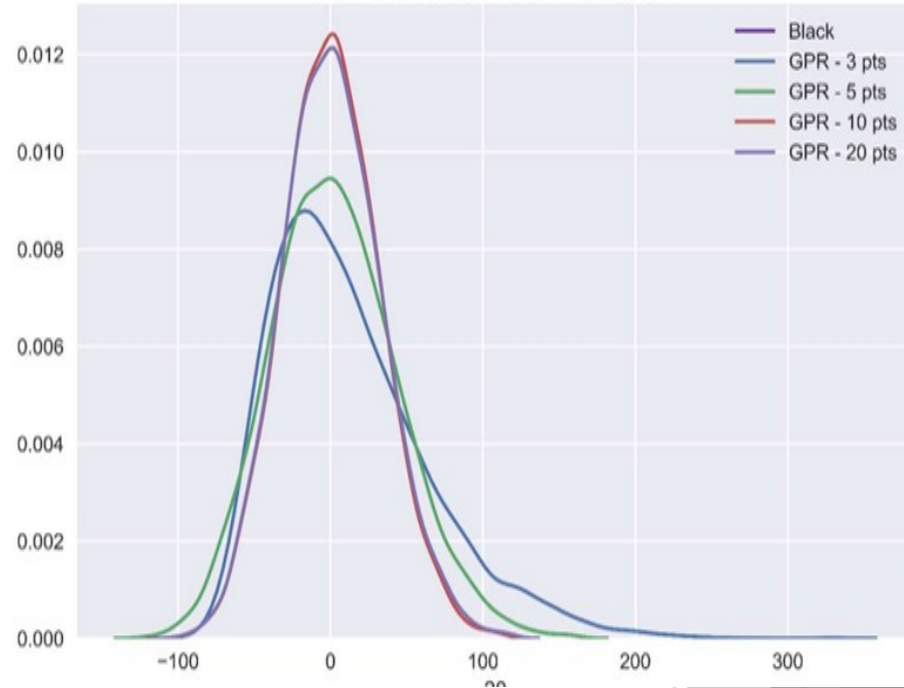
In this paper, we roll out Gaussian processes (GP), a powerful algorithm for both regression and classification, to tackle the revaluation performance problem of the whole derivatives securities trading portfolio. To do this, the GP algorithm must learn the valuation task of all pricing models by training it directly on a data set generated by sophisticated pricing models. This is possible since we postulate that the pricing models are available and used only for the valuation purposes. Then, the trained GP algorithm takes over to carry out the repeated revaluation of the derivatives security's portfolio in a fast and efficient way. Notice here that no need to learn to the GP algorithm to separately revalue each derivative security composing the portfolio. Nevertheless, the whole portfolio can be rearranged, if necessary, in terms of sub portfolios and the risk factors nature to parallelize the training stage. The numerical tests show that the Gaussian process regression (GPR) can drastically improve the computing time whilst ensuring an excellent level of accuracy. For example, the 99% Value at Risk over one day horizon computed with one million of simulations is achieved with around five seconds. In addition, the speed-up of the calculation of the VaR and the expected shortfall within the GPR framework is independent of the size and the composition of the trading portfolio, which is spectacular. For this, it seems to us that it is more profitable for the Banks to build their risk models using the powerful of the GPR techniques in terms of the calculation accuracy and the speed-up.

Keywords: Market Risk Management, Value-at-Risk, Expected Shortfall, Machine Learning, Regression, Classification, Gaussian processes, Kernel function, Monte Carlo simulations, Convex Optimization, Conditional Probabilities, Bayes theorem, Pricing models.

Declaration of interest: The views expressed in this paper are solely those of the authors and do not necessarily reflect the views and policies of Natixis

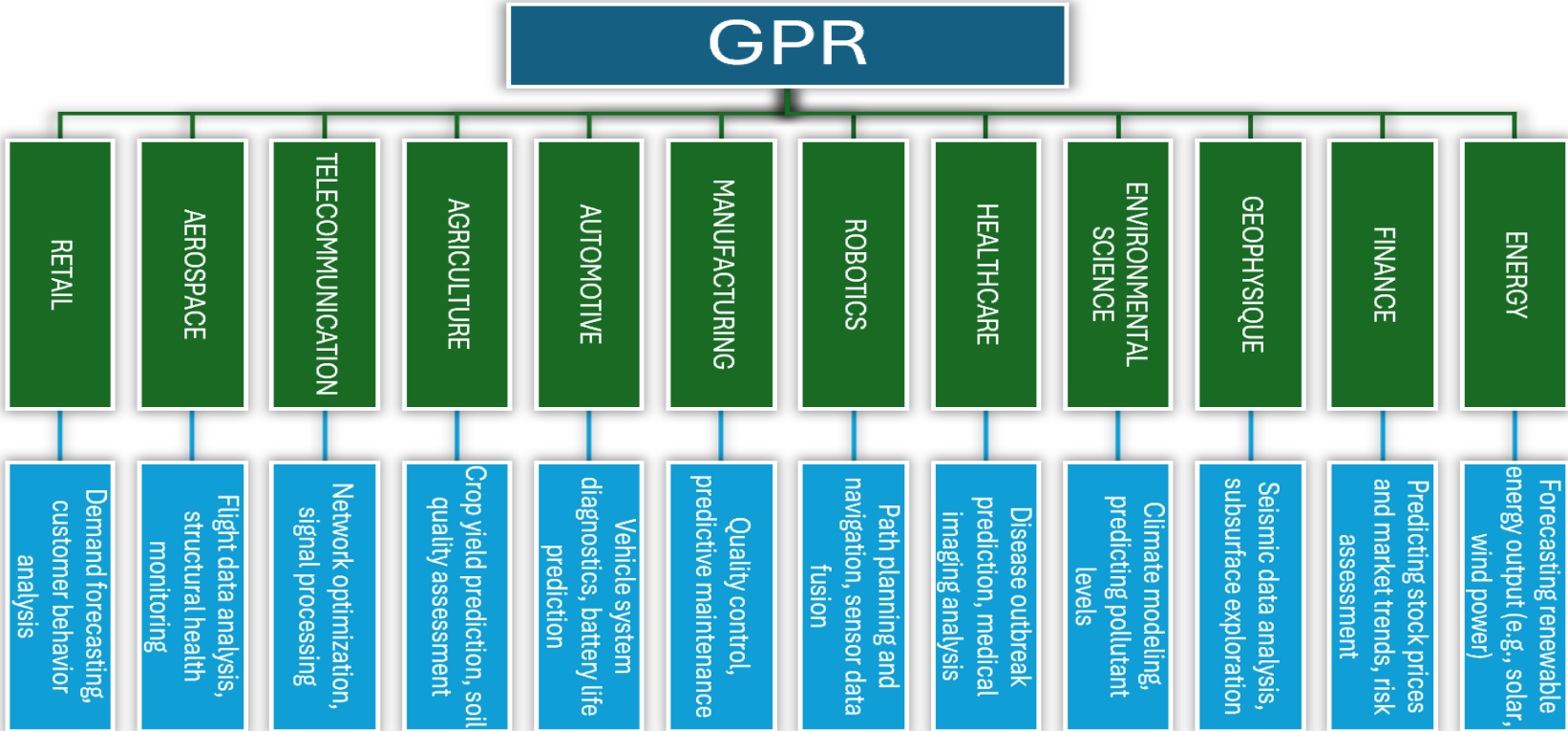
¹ The target review of internal models, or TRIM, is a European Central Bank (ECB) project to assess whether the internal models currently used by banks comply with regulatory requirements, and whether their results are reliable and comparable. One major objective of TRIM is to reduce inconsistencies and unwarranted variability when banks use internal models to calculate their risk-weighted assets (a commonly used regulatory metric that "weights" a bank's assets based on their riskiness and constitutes a key factor in determining the bank's own funds requirements).

P&L Distribution - GPR convergence

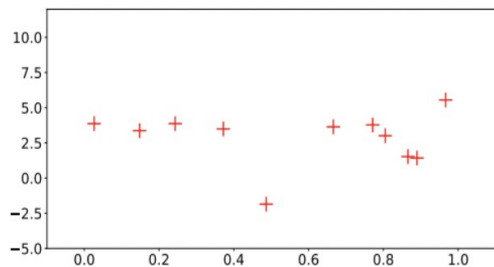


GPR algorithm has time complexity $O(N^3)$ where N is size of the training sample

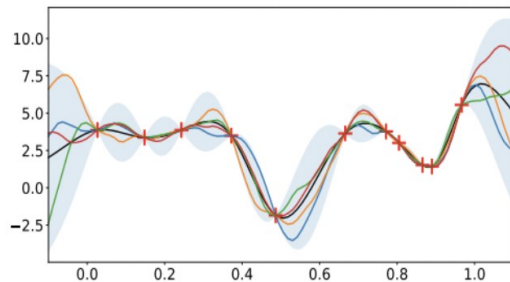
Multifaceted Applications of GPR in Industries



Bottlenecks for implementing Gaussian Processes



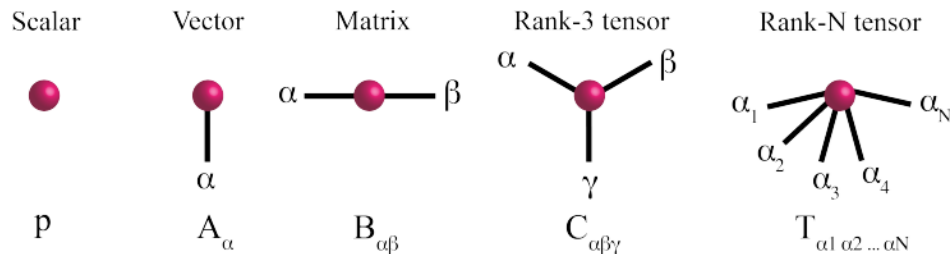
Training a GPR and/or making inferences with the trained model requires inverting the covariance matrix. The overall computation complexity is $O(N^3)$, where N is the number of datapoints/observations, and the memory consumption is quadratic.



→ Computational complexity and memory usage are clear bottlenecks for implementing Gaussian Processes (GP) with big datasets. [Sparse GP](#) can be used to tackle regression tasks with big datasets, but it often requires doing some approximation to the kernel function.

Defining Quantum-Inspired Algorithms network with Tensor Networks

Tensor Networks (TN) are mathematical decompositions of highly correlated structures



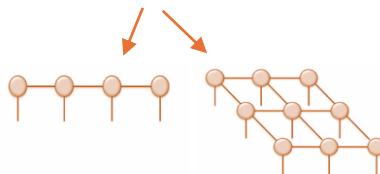
$$Q_{\alpha\gamma} = \sum_{\beta} R_{\alpha\beta} S_{\beta\gamma}$$

α — Q — γ = α — R — β — S — γ

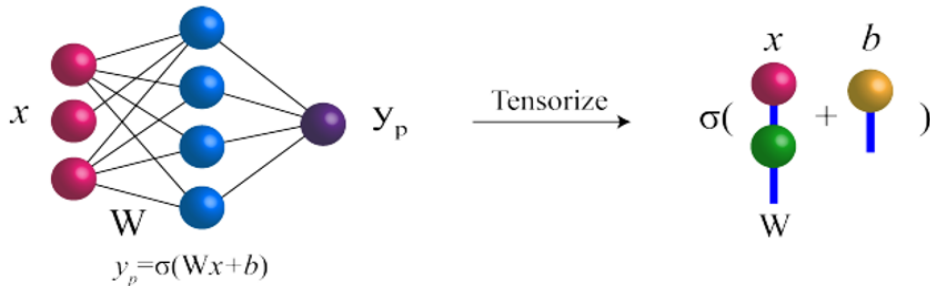
Defining Quantum-Inspired Algorithms network with Tensor Networks

- TN are widely used by physicists for computing properties of quantum and classical systems
- They reduce dimensionality and can be used to tackle quantum mechanics simulation problems

$$|\Psi_{\text{many body}}\rangle = \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n} \Psi_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n} |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\rangle$$



- Or optimization, AI, ... among others



Possible approaches to reduce the dimensionality

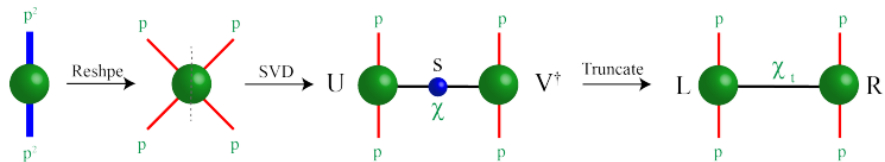
Quantum inspired enhanced GPR

Training a GPR and/or making inferences with the trained model requires inverting the covariance matrix, which is a costly process.

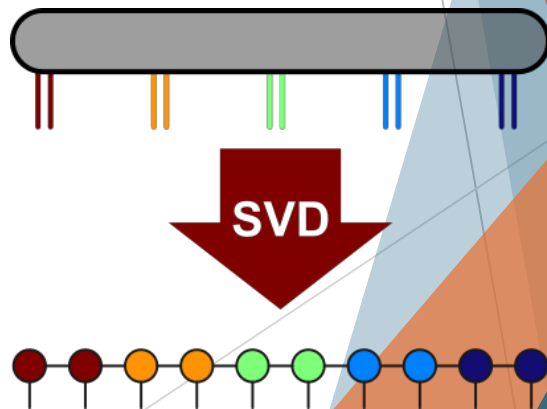
We can make this computation without explicitly inverting the matrix A with TN, by solving the linear equation $A x = f$.

1. Represented the covariance matrix with a Tensor Network.
2. Use TN algorithms (DMRG) to solve the associated variational problem

$$x^* \rightarrow \operatorname{argmin}(x; ||Ax - f||^2)$$

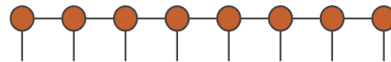


MPS/TT representation

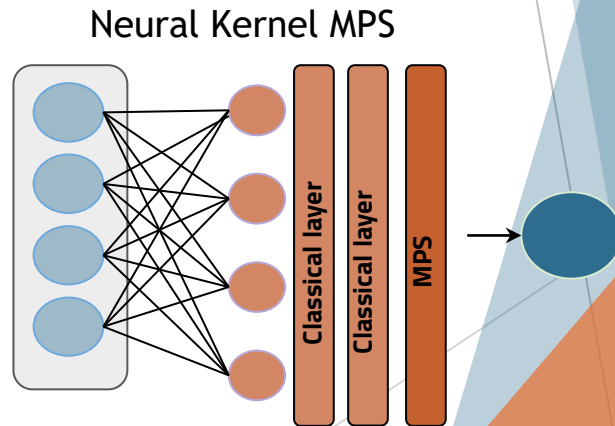
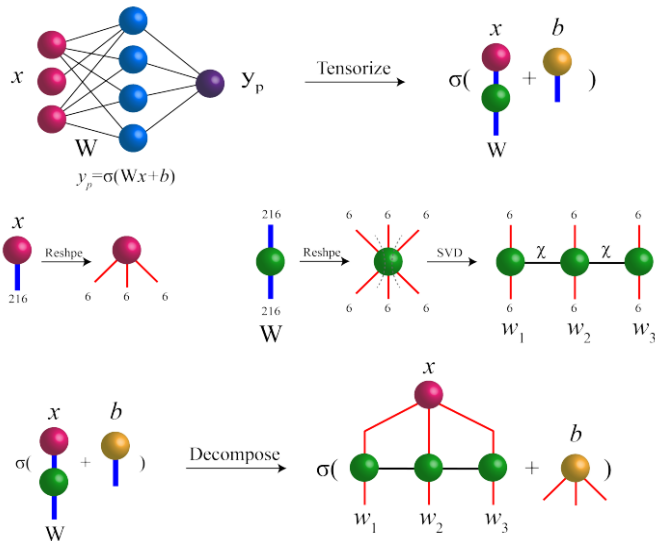


Possible approaches to reduce the dimensionality Neural Kernel MPS

The Gaussian Process can be approximated with an MPS

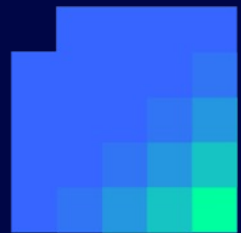


Since the representation power of pure tensor networks is limited to linear functions, extra layers are added in order to introduce non linearities. The layer neural network is used as the kernel function, which is then fed as input to the MPS.



Thank you !





QbitSoft
Quantum as a Service

matmut 

PROJET AQADEF

Avantage QuAntique pour la DEtection de Fraude

Journée de restitution Pack Quantique, Île de France
24 avril 2024
Olivier Pegeon, CEO QbitSoft

Contexte du projet

En Europe, la fraude à l'assurance représente entre 5 et 10% du montant des primes encaissées

Sujet central pour les compagnies d'assurance

Ce phénomène tend à s'amplifier notamment avec l'apparition des nouveaux sinistres d'origine climatique.

Un coût important pour la Société

Dépense d'énergie inutile, Injustice créée car le coût est réparti sur les assurés.

Problème complexe à traiter par une IA

Les technologies quantiques peuvent-elles apporter une réponse efficace ?

Approche scientifique

Problèmes à résoudre

- Les cas d'anomalie sont sous-représentés dans les bases de données
- Grande hétérogénéité des cas d'anomalie
- Grand nombre d'alertes générées par l'IA, difficiles à analyser
- Explicabilité très réduite

Approche envisagée

L'approche retenue consiste à explorer le potentiel des modèles graphiques probabilistes (PGM)

- Lien de causalité entre les variables
- Règles de classification pour les données sous-représentées
- Identification de schémas complexes entre les variables

Moyen envisagé

- Ordinateur analogique à atomes neutres

Thanks.

<https://www.qbit-soft.com/>

Olivier Pegeon

olivier@qbit-soft.com

+33 6 30 69 94 70

Projet AQADOC

Joseph Mikael (EDF) et Tom Darras (WELINQ)

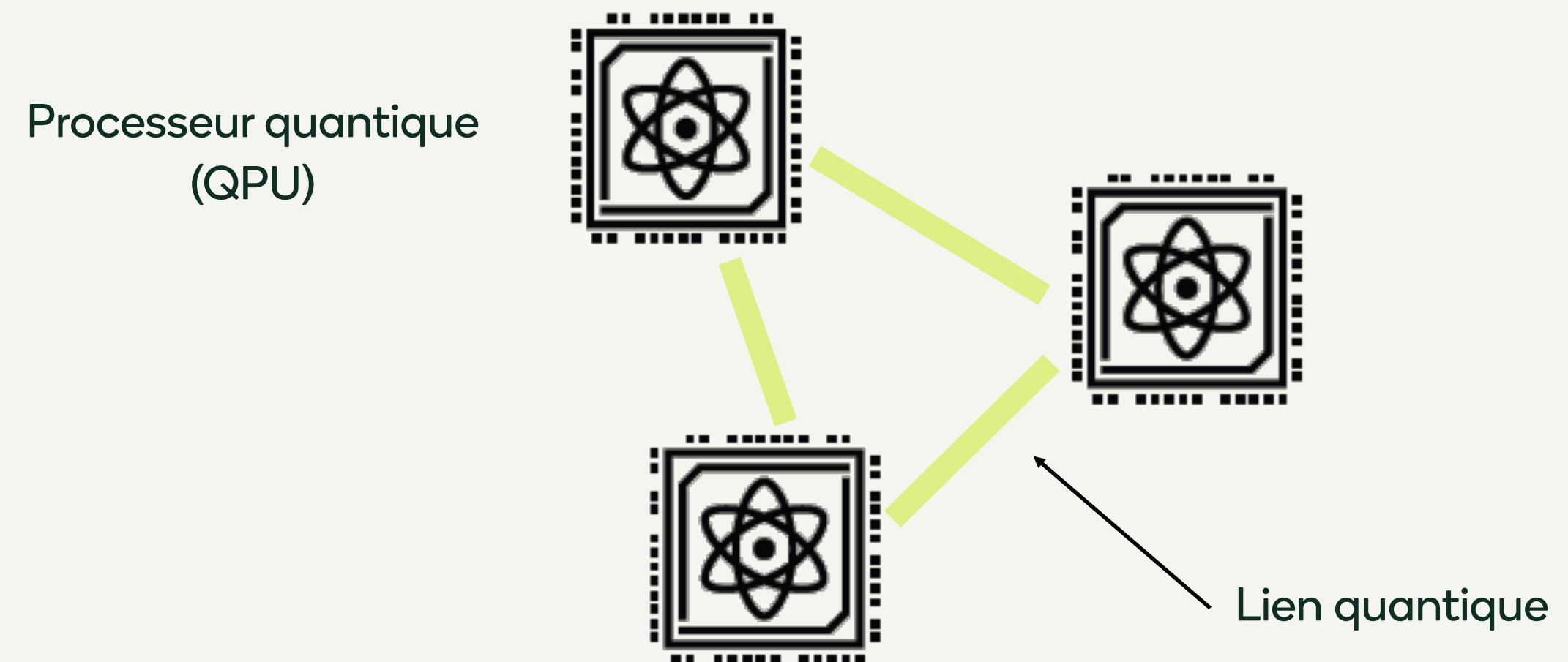
AQADOC++ Pack Quantique

Algorithmes quantiques distribués pour la production d'énergie.

Vers la pleine adoption du calcul quantique par l'industrie

Obtenir un avantage quantique sur des problèmes industriels va nécessiter un très grand nombre ($> 10\,000$) de qubits.

Même si ce n'est pas réalisable au sein d'un seul processeur quantique, une solution existe.



Des processeurs quantiques mis en réseau.

Une course mondiale

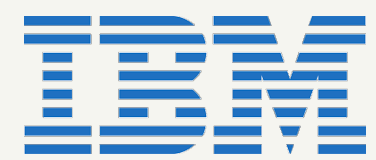
La parallélisation est sur la feuille de route des fabricants de processeurs quantiques (Amérique du Nord, Europe, Asie)

Horizon 2030



“Photonicallly networked multi-core architecture”

(Source: www.ionq.com)

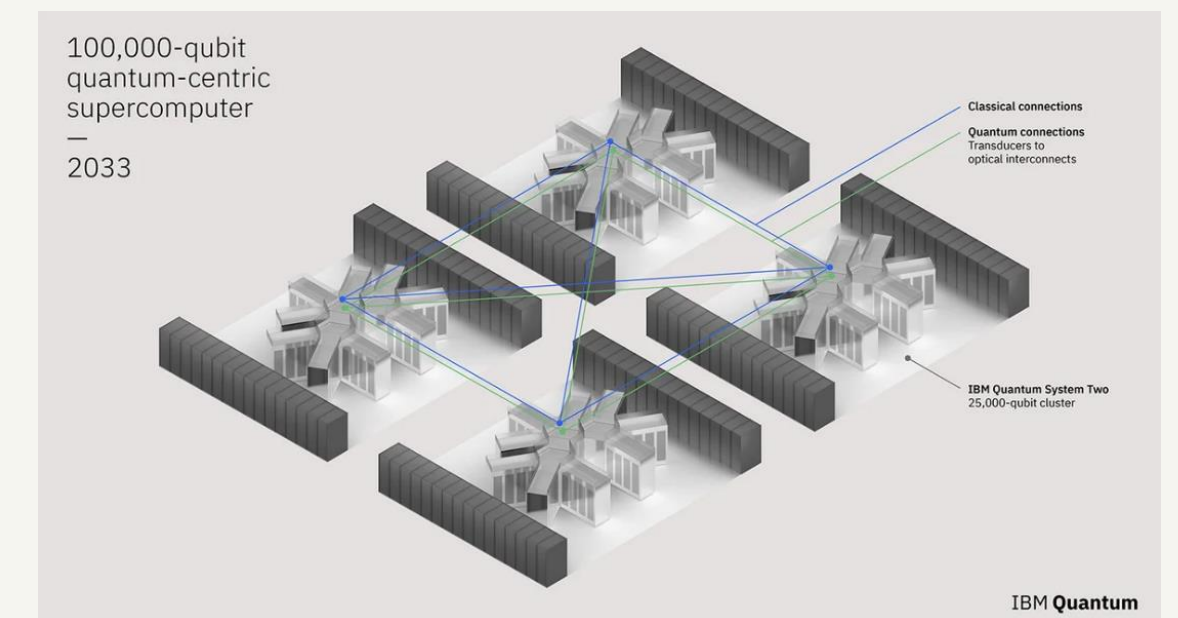


“scaling to 100 k qubits with quantum links”

(Source: www.ibm.com/quantum)



“interconnect towards scalability and practical quantum computing”



Vision et objectifs du projet

**AQADOC++: le tremplin de l'écosystème francilien
pour prendre aujourd'hui le virage de la mise en parallèle de machines quantiques**

Développer l'algorithmie quantique distribuée sur des cas industriels liés à la transition énergétique

Accélérer le développement des liens d'interconnexion répondant à ces besoins algorithmiques

Ouvrir la voie à la mise à disposition d'une capacité de calcul quantique multi-coeurs

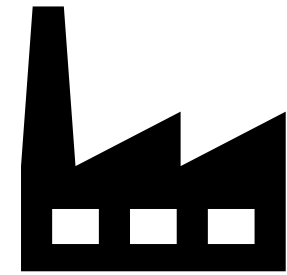
Impacts concrets du projet sur le secteur de l'énergie.

Etudes de sûreté



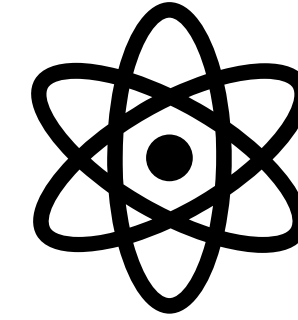
- Traitement d'arbres de défaillance.

Simulation de structures



- Fissures dans des structures.
- Ecoulements

Simulation de matériaux

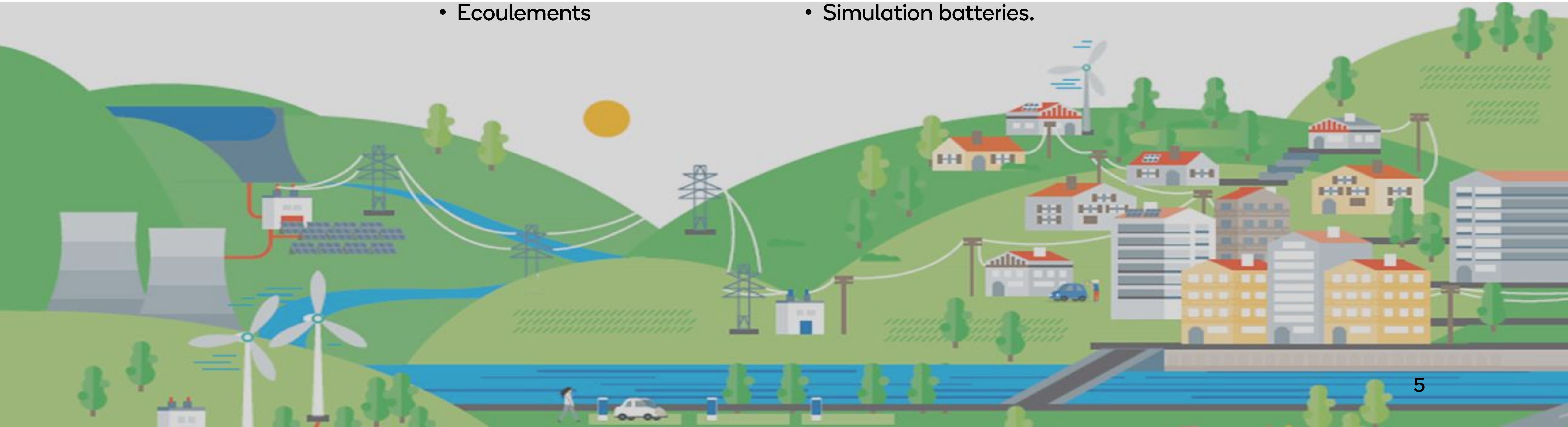


- Vieillesse des installations.
- Simulation batteries.

Problèmes logistiques



- Routage de véhicules et de puissance électrique



Exemple des études de sûreté

Etudes de sûreté



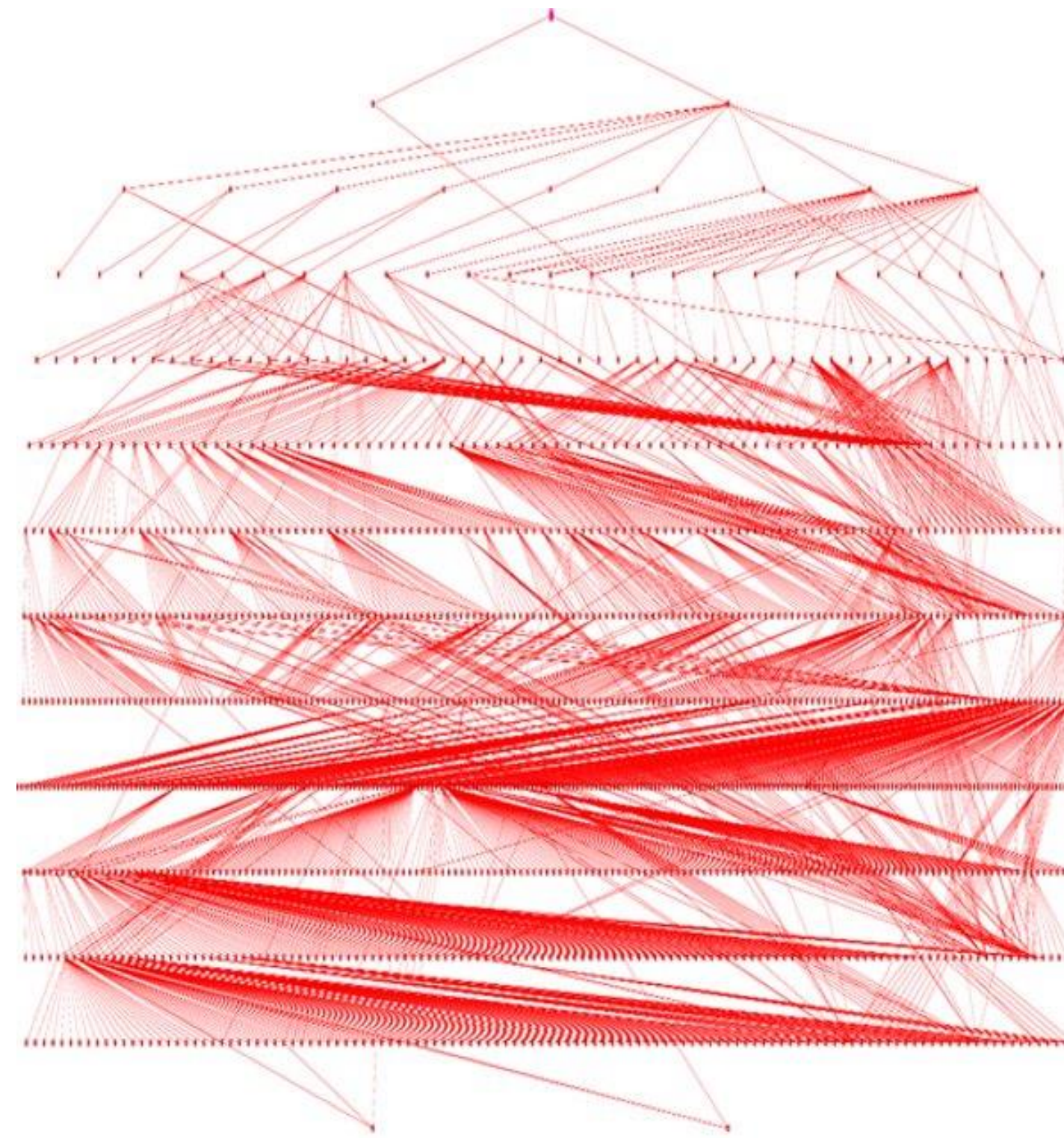
- Traitement d'arbres de défaillance.

Objectif ?

Evaluer les risques en explorant systématiquement tous les scénarios pouvant mener à un dysfonctionnement.

Comment ?

Les combinaisons possibles de défaillances sont regroupées dans un *arbre de défaillance* parcouru par un algorithme.



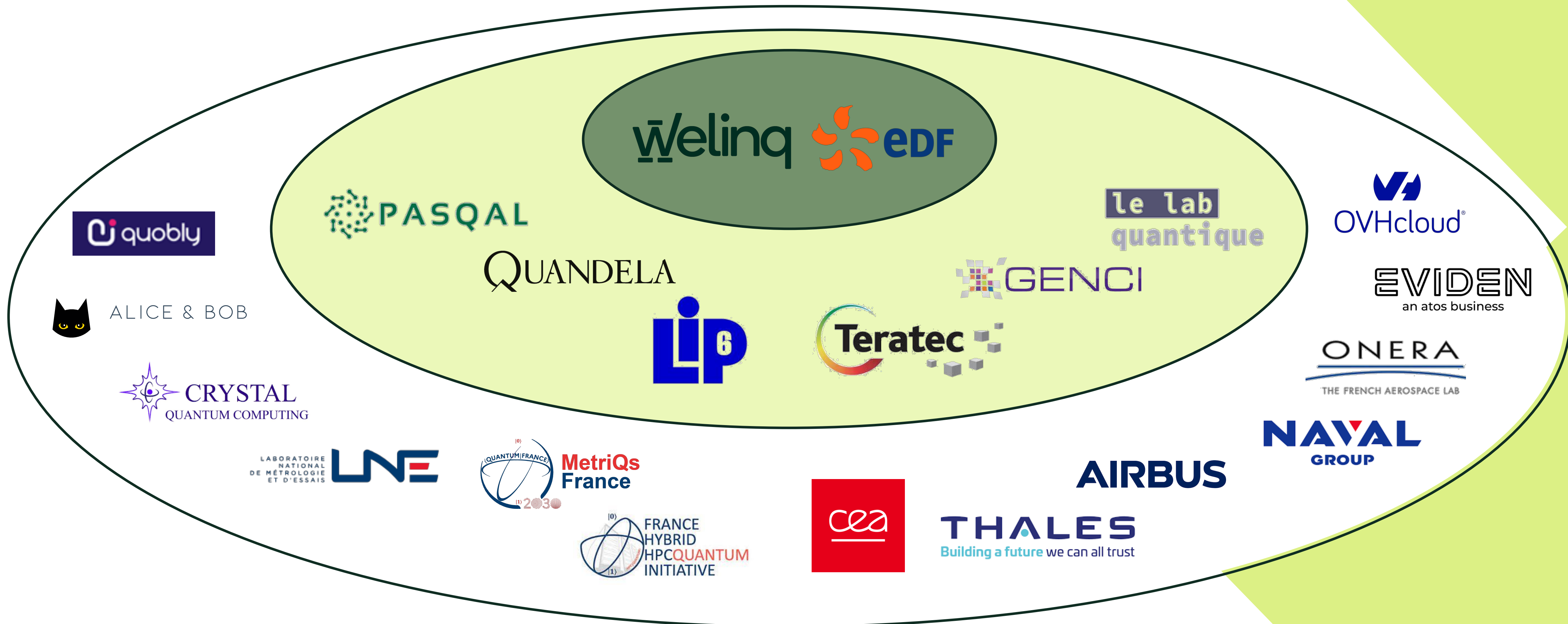
Arbre de défaillance avec 10 événements

Et le quantique ?

Calculs plus rapides à exécuter et permet aussi une vision dynamique
Pouvoir résoudre des problèmes plus gros (1000 au lieu de 10)

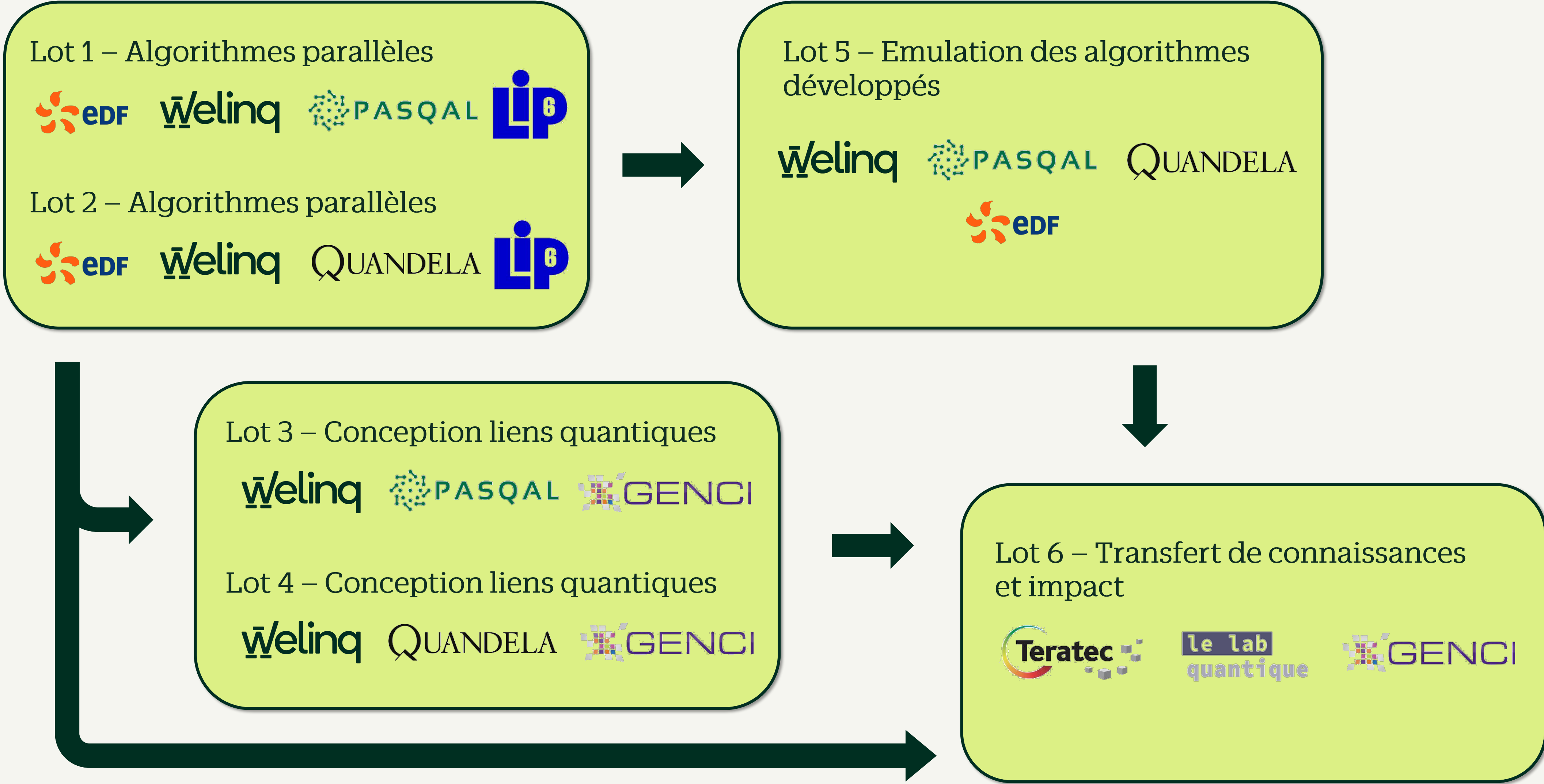


AQADOC++ : un projet d'envergure intégré dans l'écosystème

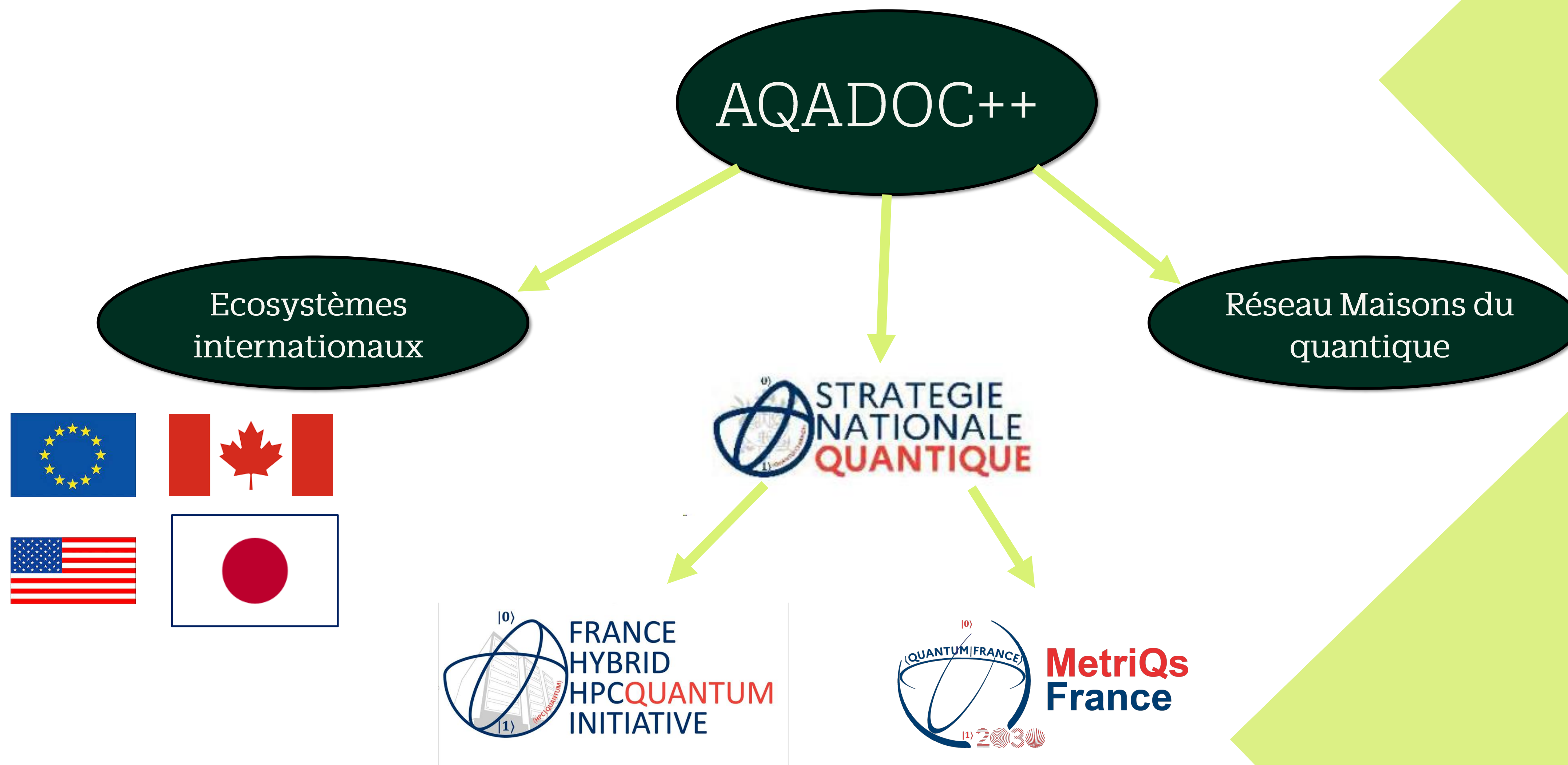


Un consortium complémentaire d'acteurs investis sur la parallélisation du calcul quantique.

Trois ans (2024 – 2027), six lots



Synergies avec les initiatives nationales et internationales





Merci !

Présentation de la plateforme HQI (France Hybrid HPC Quantum Initiative)

Félix Givois (GENCI)



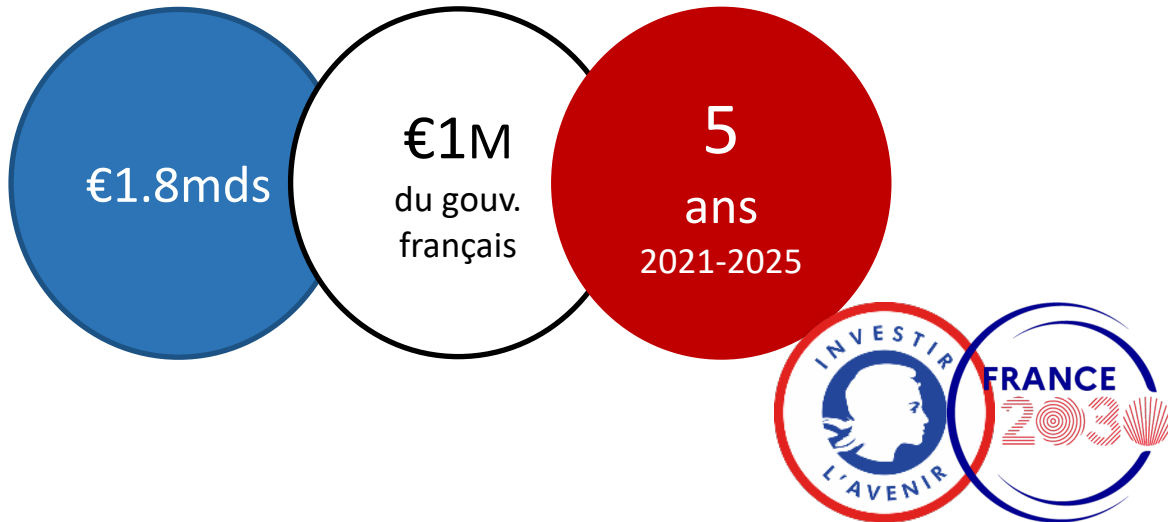
Présentation de la plateforme HQI



LA STRATÉGIE NATIONALE QUANTIQUE

Soutien à la compétitivité national









- Une initiative issue de **la Stratégie Nationale Quantique (SNQ)**
- Annoncée par le Président Emmanuel Macron le 21 janvier 2021



Neil Abroug, SGPI
*Coordinateur de la
Stratégie Nationale
Quantique*

Une **plateforme hybride HPC-QC de production**
et
Un **programme de recherche académique et industrielle**



Achat et déploiement de plateformes quantiques	 GENCI (36,3 M€) <small>Le calcul intensif au service de la connaissance</small>	
Recherche académique	 (36,0 M€)	 <small>an atos business</small>  
Recherche industrielle		 <small>Le calcul intensif au service de la connaissance</small> 
Diffusion et support aux communautés d'utilisateurs		

72,3M€



Design et implémentation

Applications Exploration



Hosted at



Plateformes communautaires



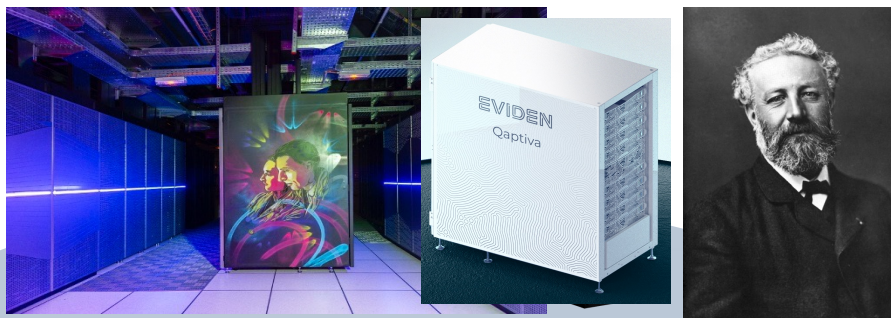
Evènements



Relations internationales



PULSER



Pile logicielle HPC-QC commune



Formations pratiques



Equipe de support applicatif (HLST)



Cas d'usage



Maisons du Quantique



PREMIERS SERVICES DISPONIBLES DEPUIS FIN 2022... D'AUTRES À VENIR!

72,3M€



Design et implémentation

Applications Exploration



Hosted at



7-9 Nov. 22' Paris (Sorbonne Université)

At the Crossroads of Physics and Software!

LOQCathon

Powered by Quantivis with a partnership of QICS (Quantum Information Center Sorbonne)



Pile logicielle HPC-QC commune

Déjà disponible
... d'autres seront annoncés prochainement!

PASQAL
<HPC|QS>

QPU photonique EuroQCS-France

QPU



PREMIERS SERVICES DISPONIBLES DEPUIS FIN 2022... D'AUTRES À VENIR!

72,3M€

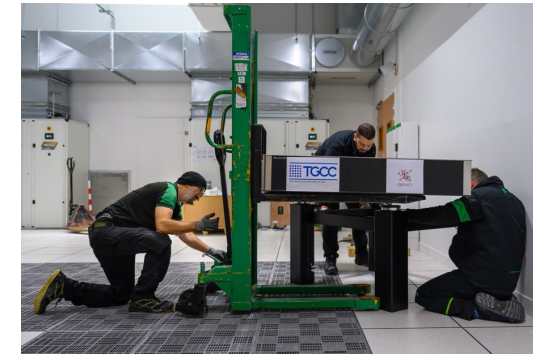
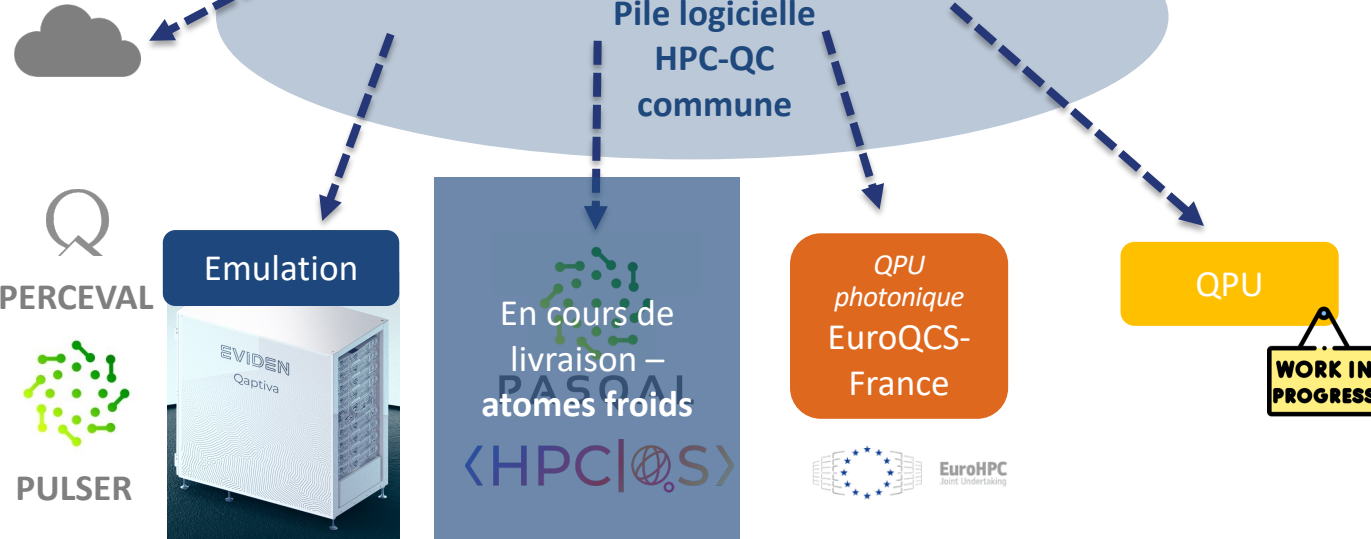


Design et implémentation

Applications Exploration



Hosted at



PREMIERS SERVICES DISPONIBLES DEPUIS FIN 2022... D'AUTRES À VENIR!

72,3M€



Design et implémentation

Applications Exploration

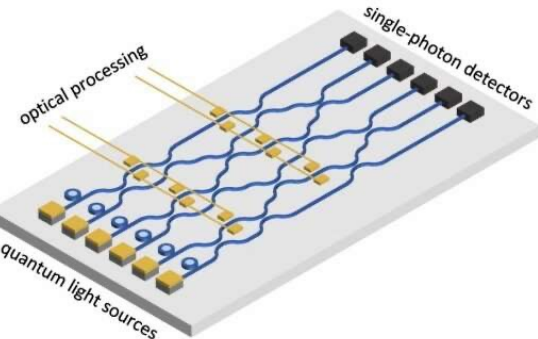


EuroHPC Joint Undertaking

Hosted at



Pile logicielle HPC-QC commune



PREMIERS SERVICES DISPONIBLES DEPUIS FIN 2022... D'AUTRES À VENIR!

72,3M€



Design et implémentation

Applications Exploration



Hosted at

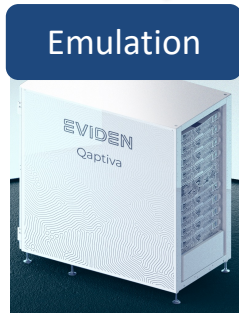


Pile logicielle HPC-QC commune



PULSER

Emulation



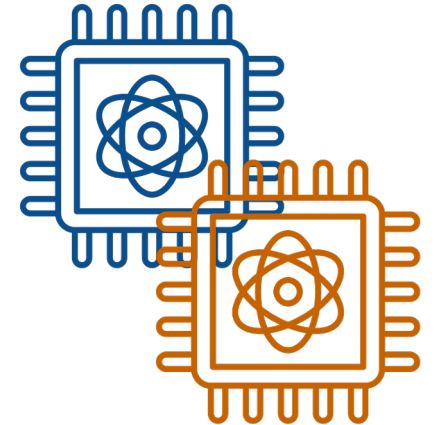
PASQAL

<HPC|Q|S>

QPU photonique EuroQCS-France



En cours de préparation – qubits de spin et liens quantiques



PREMIERS SERVICES DISPONIBLES DEPUIS FIN 2022... D'AUTRES À VENIR!

72,3M€



Design et implémentation

Applications Exploration



Hosted at



Plateformes communautaires



Evènements



Relations internationales



PULSER



Pile logicielle HPC-QC commune



Formations pratiques



Equipe de support applicatif (HLST)



Cas d'usage



Maisons du Quantique



PREMIERS SERVICES DISPONIBLES DEPUIS FIN 2022... D'AUTRES À VENIR!

HQI – FRANCE HYBRID HPC QUANTUM INITIATIVE

Accès à la plateforme de HQI et demandes d'accès

www.edari.fr

Comment obtenir des ressources de calcul et de stockage ?

Demande de ressources ou demande d'accès	Pour qui, quel usage et quelles conditions ?	Documents de référence	Actualités
<p>Demande de ressources à GENCI (porteur de projet)</p> <ul style="list-style-type: none"> Schéma explicatif Clôture de l'appel pour les Accès Réguliers (AR) le 03/09/2024 à 23h59 Allocation A17 (détails) Demandes compl. A16 (détails) <p>Demander un Accès Dynamique ou un Accès Régulier</p> <p>Demande d'accès aux ressources d'un projet (utilisateur)</p> <ul style="list-style-type: none"> Schéma explicatif <p>Faire une demande de compte sur les calculateurs</p>	<ul style="list-style-type: none"> Recherche académique ou industrielle Calcul haute performance, intelligence artificielle, traitement de données <p>Conditions</p> <ul style="list-style-type: none"> Appartenir ou être associé à une structure de recherche française Faire de la recherche donnant lieu à publication Déposer un rapport d'activités à la fin de la période d'attribution de vos ressources. 	<ul style="list-style-type: none"> Livret d'information des services et ressources GENCI dans les centres de calcul nationaux Modalités d'accès aux ressources nationales Guide utilisateurs Modèles pour la rédaction <ul style="list-style-type: none"> d'un dossier de demande d'un rapport d'activité Conditions Générales d'Utilisation (CGU) eDARI Contacts et FAQ Liste des Comités Thématiques Vous pouvez dès maintenant lister, via une recherche multicritère, les dossiers des 10 dernières années qui ont eu des ressources sur les moyens de GENCI. 	<ul style="list-style-type: none"> Depuis fin octobre, le seuil entre les Accès Dynamique et Réguliers est normalisé, il est de 50 kh GPU V100 et de 500 kh cœur CSL. Pour information : 1 GPU MI250=2 GPU A100=4 GPU V100. Ainsi, si vous demandez 30 kh A100, vous serez redirigé vers un Accès Régulier lors de votre demande. Toute l'actualité en IA analysée par le support IA de l'IDRIS est à retrouver Ici Tous les appels d'EuroHPC (AI and Data-Intensive Applications, Regular et Extreme Scale Access Mode) sont ouverts en permanence, n'hésitez pas à postuler sous ce lien Vidéos de la chaîne GENCI et des deux forums utilisateurs de GENCI

Caractéristiques des supercalculateurs accessibles



Supercalculateur Joliot Curie/Irene : Bull Sequana X1000 et XH2000 de 20,00 Pflops



Centre de Calcul : TGCC

Marque du calculateur : Bull

Modèle : Sequana X1000 et XH2000

Complément de Description :

de multiples partitions offrent une grande variété de processeurs.

Puissance crête en PFlops : 20,0

Réseau d'intercommunication : InfiniBand HDR100

Topologie : Dragonfly+

▶ Partition Joliot Curie/Irene Rome

▶ Partition Joliot Curie/Irene SKL

▶ Partition Joliot-Curie/Irene V100

▶ Partition Plateforme Quantique



QUANTUM VILLAGE BY HQI @ VIVATECH 2024

Le seul stand entièrement dédié au calcul quantique
sur le plus grand salon de la tech !

VIVA MAY 22-25
2024 PARIS
TECHNOLOGY

Stand
L12



- **12 start-ups** hébergées pendant 4 jours
- **3 principaux sponsors**
- **~25 sessions** de pitch
- **4 à 5 panels** et tables rondes
- **Sessions de vulgarisation** le samedi 25 mai

VENEZ A LA RENCONTRE DE NOTRE ECOSYSTEME !



HQI France



@HQI_France

www.edari.fr

Demande de ressources ou demande d'accès	Pour qui, quel usage et quelles conditions ?	Documents de référence	Actualités
<p>Demande de ressources à GENCI (porteur de projet)</p> <ul style="list-style-type: none"> Schéma explicatif Clôture de l'appel pour les Accès Réguliers (AR) dans : 35 16 49 58 JOURS HEURES MINUTES SECONDES Allocation A14 Demandes compl. A13 Début: 09/09/2022 - 18h00 Fin: 14/02/2023 - 11h00 Demandez un Accès Dynamique ou un Accès Régulier <p>Demande d'accès aux ressources d'un projet (utilisateur)</p> <ul style="list-style-type: none"> Schéma explicatif Faire la demande d'accès 	<ul style="list-style-type: none"> Recherche académique ou industrielle Calcul haute performance, intelligence artificielle, traitement de données <p>Conditions</p> <ul style="list-style-type: none"> Appartenir ou être associé à une structure de recherche française Faire de la recherche donnant lieu à publication Déposer un rapport d'activités à la fin de la période d'attribution de vos ressources. 	<ul style="list-style-type: none"> Livret d'information des services et ressources GENCI dans les centres de calcul nationaux Modalités d'accès aux ressources nationales Guide utilisateurs Modèles pour la rédaction <ul style="list-style-type: none"> d'un dossier de demande d'un rapport d'activité Conditions Générales d'Utilisation (CGU) eDARI Contacts et FAQ Liste des Comités Thématiques 	<ul style="list-style-type: none"> IDRIS : Les demandes d'Accès Dynamiques sont maintenant ouvertes sur la partition Jean Zay A100 (GPU) CINES : La machine Adastra est maintenant disponible pour les Accès Dynamiques et pour les Accès Réguliers dans l'allocation A13. TGCC : La partition KNL a été arrêtée mi-novembre 2022, plus aucune attribution n'est possible. La tension actuelle sur l'électricité (délestages et coût) pourrait affecter la disponibilité des calculateurs dans les 3 centres en 2023. Vidéos de la chaîne GENCI et des deux forums utilisateurs de GENCI

Caractéristiques des supercalculateurs accessibles			
<p>CINES - Adastra</p> 	<p>IDRIS - Jean Zay</p> 	<p>TGCC - Joliot-Curie/Irene</p> 	<p>Prototypes</p> 

MERCI

Pour plus d'informations sur la plateforme HQI, merci de contacter:



Félix Givois

Ingénieur Projets Calcul Quantique @ GENCI

felix.givois@genci.fr



PULSER



Emulation



Présentation des ateliers techniques

Jean-Baptiste Latre (Qualitative Computing pour TERATEC)

Daniel Vert (SYSTEMATIC)

Félix Givois (GENCI)

Salle A1-116

14h00 : Méthodes de calcul hybrides pour résoudre des problèmes d'optimisation combinatoire

14h40 : L'informatique quantique au service de la détection de fraude à l'assurance

15h20 : Modélisation et algorithmes pour le calcul quantique : réseaux de tenseurs et algèbres de Lie

Salle A1-128

14h00 : Approche photonique pour l'application au routage de drones.

14h40 : Comment l'ordinateur quantique peut booster le design de nouveaux matériaux pour l'industrie ?

15h20 : Simulation of Atomic Layer Deposition with a carbon nanotube based quantum computer and emulation results

Salle Amphi 1

13h40 : Session de pitches

14h00 : Evolutions possibles des Packs et industrialisation- Débat animé par Joseph Mikael (EDF) et Frédéric Barbaresco (THALES)

14h40 : Overview of the chemical problem in a drug discovery perspective

15h20 : Calcul quantique à basse consommation énergétique pour un développement durable

Prochains événements



21 mai – à station F :
France Quantum



22 au 25 mai :
Quantum Village by
HQI

24 mai : Région IDF



4 et 5 juin – à Reims :
Séminaire TQCI dédié aux
initiatives de benchmark



5 sept – à Bois-Colombes
Séminaire TQCI dédié au
passage à l'échelle



13 et 14 nov – EDF Lab
Que reste-t-il à faire sur
les algorithmes ?



Session de pitches 13h40-14h

Amphi 1

13h40-13h43	IRT SYSTEM X	Novel hybrid classical-quantum techniques for physical simulation using quantum algorithms and numerical methods	Sunheang Ty
13h44-13h47	ARTEFACT	Quantum advantage for optimization	Emmanuel Malherbe
13h48-13h51	DATAVALORIS	Deep-Neuroévolution Quantique: pour optimisation et génération automatique de modèles (LLM, CV, IOT...)	Jean-Patrice Glafkidès
13h52-13h55	CRYSTAL QUANTUM COMPUTING		Quentin Bodart
13h56-13h59	SEE	Conférence SEE QUEST-IS (QUantum Engineering Sciences & Technologies for Industry & Services)	Frédéric Barbaresco & François Gérin

Novel hybrid classical-quantum techniques for physical simulation using quantum algorithms and numerical methods

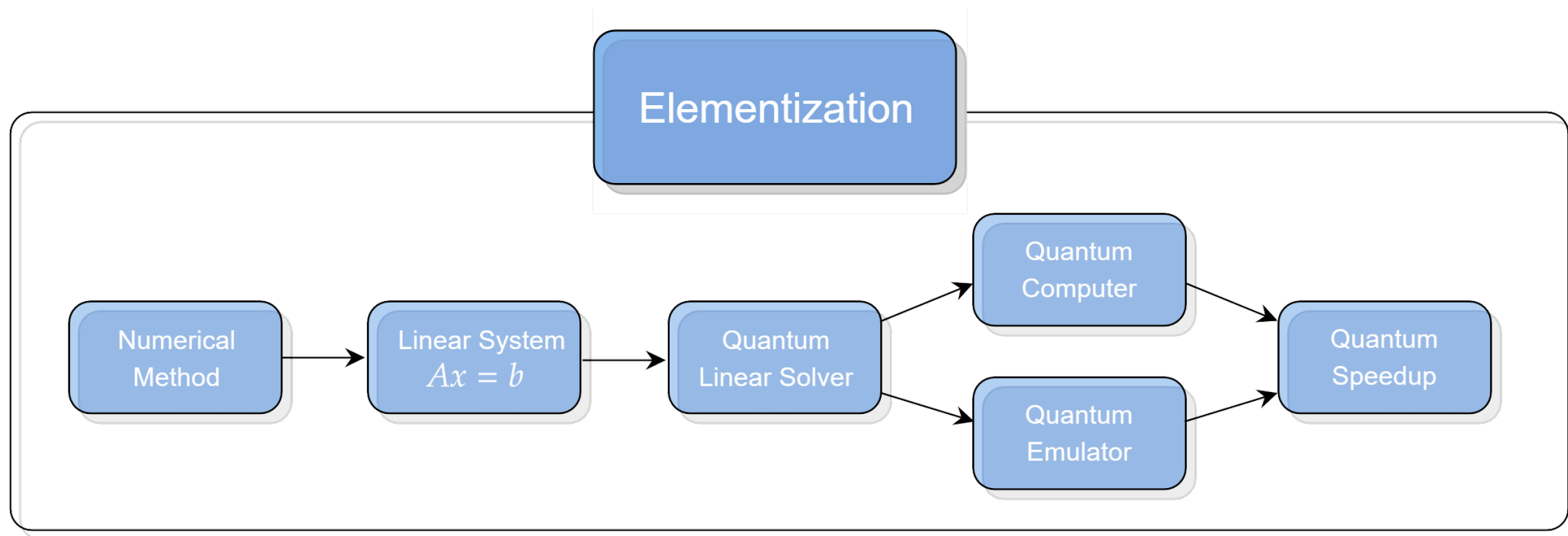


Sunheang Ty
IRT SYSTEM X

Contactez-moi: sunheang.ty@irt-systemx.fr

Quantum Computational Mechanics (QCM)

Novel hybrid classical-quantum techniques for physical simulation using quantum algorithms and numerical methods



Quantum Advantage for Optimization

ARTEFACT
AI IS ABOUT PEOPLE

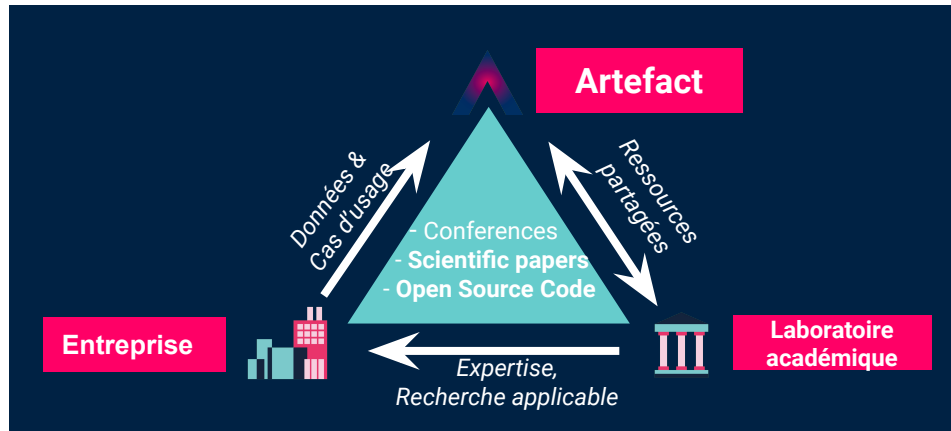
Emmanuel Malherbe
ARTEFACT

Contactez-moi:
emmanuel.malherbe@artefact.com

Artefact Research Center

Intention de monter une thèse CIFRE “Quantum Advantage for optimization and Operational Research”

- ∧ Artefact, PME dans les services aux entreprises, spécialisé en IA et Data - *couche software et algorithmes*
- ∧ Encadrerait et financerait une thèse sur les **bénéfices du quantique dans l’optimisation et la recherche opérationnelle**
- ∧ Laboratoire académique ciblé: **LIP6 à Sorbonne Université** (partenaires du Sorbonne Center for AI)
- ∧ Utilisation du système Pasqal de la plateforme HQI
- ∧ Habitué des montages de **recherche tripartites** pour des thèses en ML et algorithmique



Deep-Neuroévolution Quantique: pour optimisation et génération automatique de modèles (LLM, CV, IOT...)



Jean-Patrice Glafkidès
DATAVALORIS

Contactez-moi: jp@datavaloris.com

CONFIDENTIEL

ml**ES**ptim
WHEN AI RAISE

TROUVER LES MODELES D'IA LES PLUS FRUGAUX

DOMAINE : (NAS) NETWORK ARCHITECTURE SEARCH

🔗 Objectif Projet : Faire des modèles de Deeplearning frugaux et optimisés

🔗 Pallier aux limites du Deeplearning (besoin de puissance, inexistence de règles de construction des modèles...)

🔗 Bénéficier des Avantages du quantique (Rapidité)

🔗 Comment :

🔗 Allier algorithmes génétiques, algo deeplearning et le quantique

🔗 Verrous technologiques

🔗 Quantique : gestion des données, modélisation des graphes des modèles de DL

🔗 Hybride : Coût de passage quantique/classique

🔗 Homomorphisme modèle DL Quantique et Classique

CONFIDENTIEL

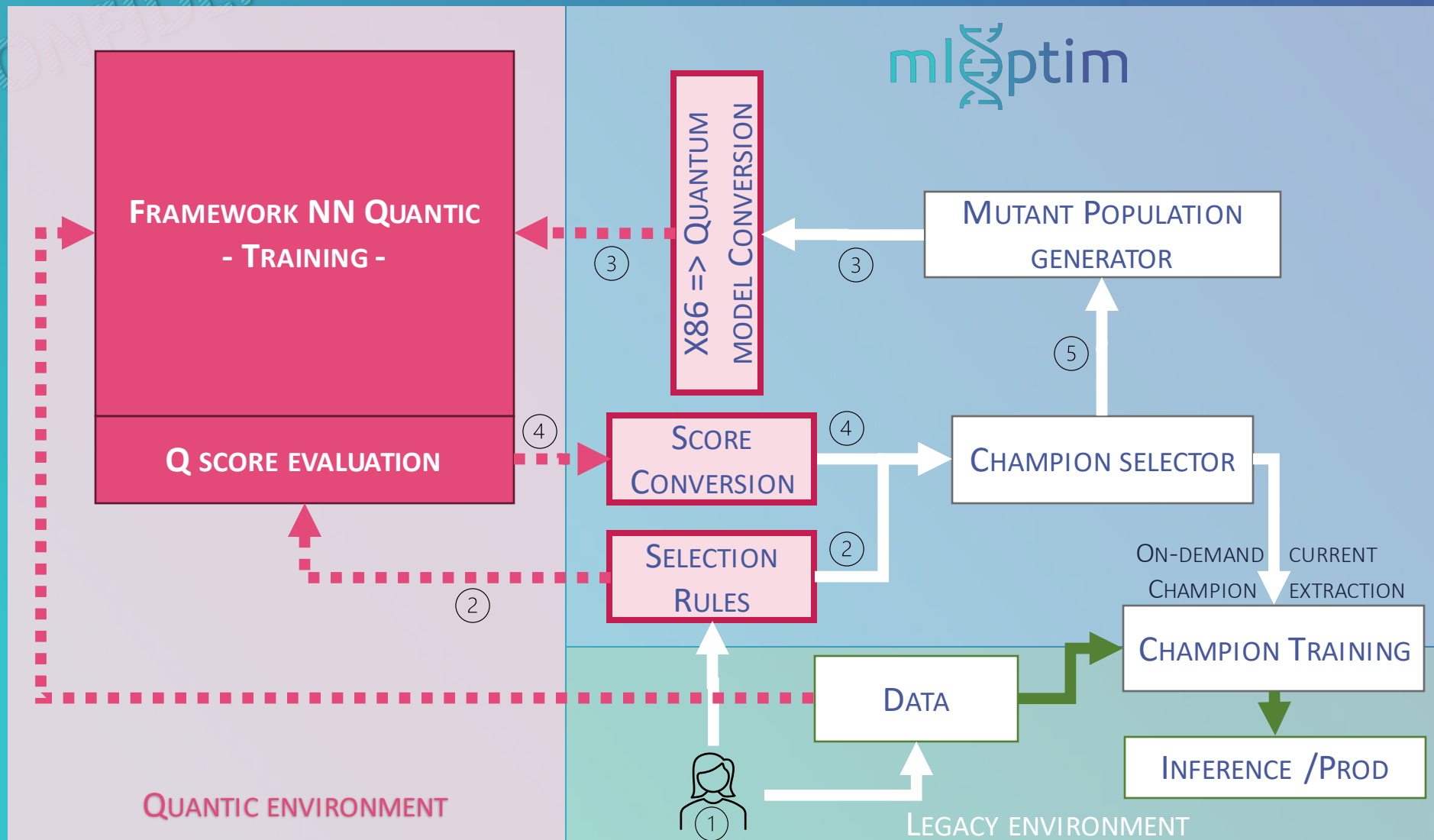
APPROCHE ITÉRATIVE DE MLOPTIM

Pour travailler sur un projet opérationnel qui tient compte des limitations du quantique et qui apporterait une réponse aux problèmes de l'IA et en utilisant la technologie de mloptim nous articulons de la façon suivante :

- Phase 1 :

- Focaliser sur la détection des meilleurs modèles
- Utiliser le quantique pour évaluer le modèle
 - Ne pas chercher à transposer le modèle champion dans le monde non quantique
 - Transposer les populations de modèle au format quantique
- Utiliser notre moteur évolutif pour générer les modèles et les sélectionner
- Une fois le champion identifié, l'apprentissage se fera dans le monde non quantique car la récupération des poids du modèle quantique est trop coûteux. (Cf Phase 2)

CONFIDENTIEL



CONFIDENTIEL

Contactez-nous



contact@mloptim.ai



+33 6 27 51 59 68

mloptim

Calcul quantique et espace: enjeux et identification des contraintes technologiques



Quentin Bodart

CRYSTAL QUANTUM COMPUTING

Contactez-moi: quent.bodart@laposte.net



CRYSTAL

QUANTUM COMPUTING

**Calcul quantique et espace : Enjeux
et Identification des contraintes
technologiques**

-

24 Avril 2024

-

Dr. Quentin Bodart

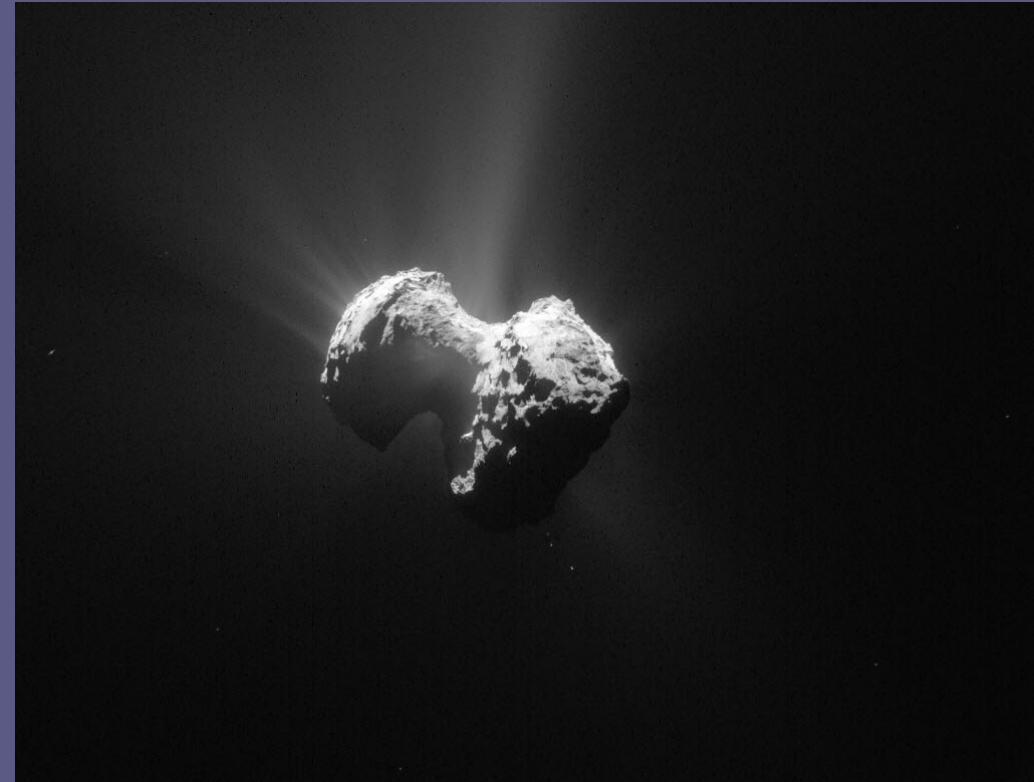
Problématiques pour l'aérospatiale

- Calcul quantique hybride pour la combustion (Projet Vulqain)
- Les simulations « Quantum Computational fluid dynamic » pour l'écoulement de l'air sur les ailes de l'avion.
- Optimisation des phases de vol pour trouver un équilibre entre les facteurs : temps de vol, consommation, confort des passagers
- Optimisation du chargement des avions
- Analyse des données spatiales. (télescopes, données de télémétrie, spectres)

Problématique pour le voyage spatial

- Ecart actuel entre technologie à terre et spatiale: 10 ans + temps de trajet de la mission.
- Transmission d'algorithmes classiques au vaisseau spatial en cours de trajet (Voyager 1 en Fortran),
- Contrôle des vaisseaux < 1 heure par l'ordinateur de bord.
- Dans les prochaines décennies, croissance très forte Hardware Quantique + Software Quantique
- En l'absence d'ordinateur quantique embarqué, pas d'amélioration pour opérer le contrôle du vol < 1 heure.
- Nous allons donc faire face dans les décennies à venir à l'augmentation de l'écart technologique Terre - Espace

Sonde Rosetta: Distance Comète Tchouri – Terre
= 500.000.000 km ~ 30 minutes lumière



Etude préliminaire pour un OQ spatial

- 1 Précédent: Envoi dans l'ISS de l'horloge atomique ACES « Atomic Clock Ensemble in Space » prévue pour 2025
- Contraintes à considérer: puissance électrique, dissipation de chaleur, laser, cryogénie, vibrations, environnement électro-magnétique
- L'ion de Rydberg est un candidat intéressant.
 - Ses avantages: porte rapide, bon contrôle de l'ion piégé avec des champs électriques, gate-based, tolérant aux fautes, modification de l'agencement, opérations indépendantes, dépendance à la température faible.
 - Ce qu'il évite: laser de piégeage, gradient de champs magnétique à dissiper, cryogénie très froide.



CRYSTAL
QUANTUM COMPUTING

Merci

Dr. Quentin Bodart, Fondateur & CEO

quentin.bodart@crystalqc.io

Conférence SEE QUEST-IS

Quantum Engineering Sciences & Technologies for Industry & Services

François Gérin – Président SEE

Frédéric Barbaresco – Responsable club SEE ISIC



Contactez-nous:

francois.gerin.ext@siemens.com

frederic.barbaresco@thalesgroup.com

Join the QUEST first International SEE Conference on Quantum Engineering

QUEST- IS 2025

4th quarter - 3 full days – Paris Region

**QUANTUM ENGINEERING SCIENCES &
TECHNOLOGIES FOR INDUSTRY & SERVICES**

From Quantum Engineering to Applications for Citizens

CONFERENCE BOARD

General Chairs

François GERIN (SEE)

Frédéric BARBARESCO (THALES & SEE)

**Organizing & Scientific Committee
under constitution**

CO-OPERATING SOCIETIES



LE GRAND PLAN
D'INVESTISSEMENT



Fédération Française de Sociétés Scientifiques
SEE · SFO · SFP · SFV

Ateliers 14h-16h

Amphi 1

14h00-14h30	Evolutions possible des Packs et industrialisation	Débat animé par Joseph Mikael (EDF) et Frédéric Barbaresco (THALES)
14h40-15h10	Overview of the chemical problem in a drug discovery perspective	Daniele Loco (QUBIT PHARMACEUTICALS)
15h20-15h50	Calcul quantique à basse consommation énergétique pour un développement durable	Krisztian Benyo (PASQAL)

Prochain atelier

Evolutions possible des Packs et industrialisation

Débat animé par



Joseph Mikael – EDF
Frédéric Barbaresco – THALES

#1 Comment négocier le passage à l'échelle
sur ces projets ?

#2 Quelle organisation spécifique les industriels doivent-il adopter (PI, verticales)

#3 Quelle organisation jointe entre industriels

#4 Réflexions sur l'utilisation des algos quantiques à l'échelle

Prochain atelier

Overview of the chemical problem in a drug discovery perspective

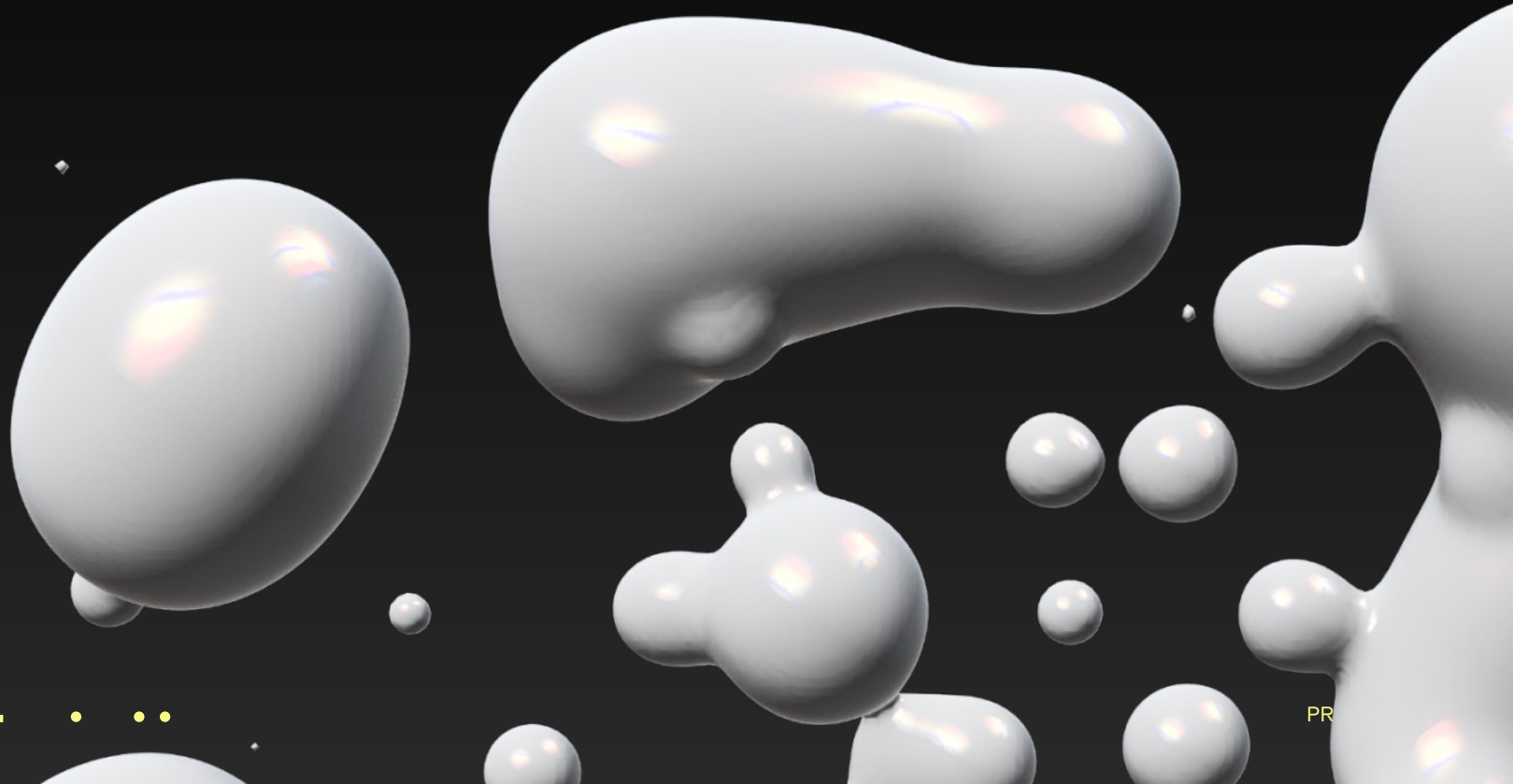
Daniele Loco

QUBIT PHARMACEUTICALS

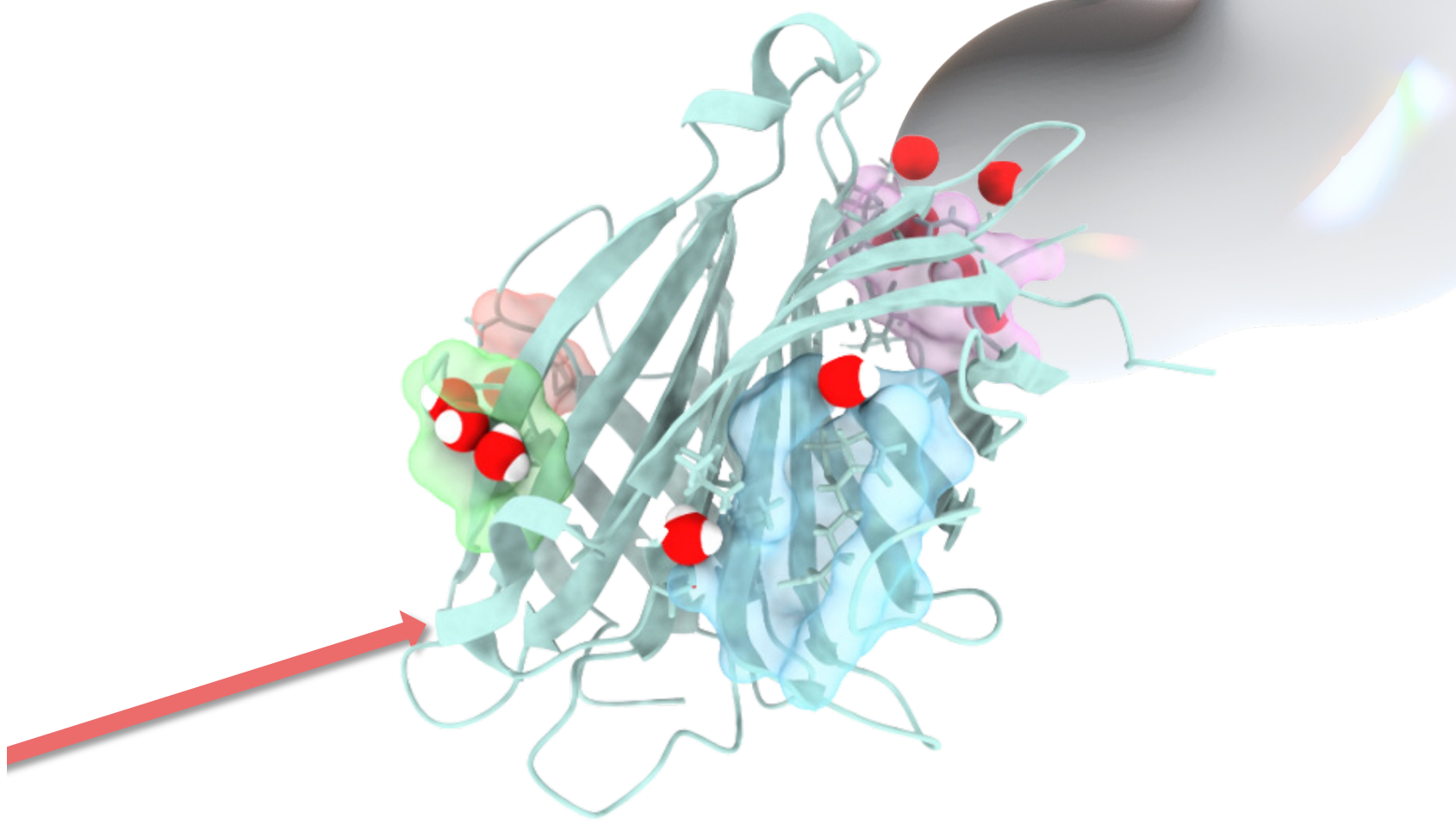
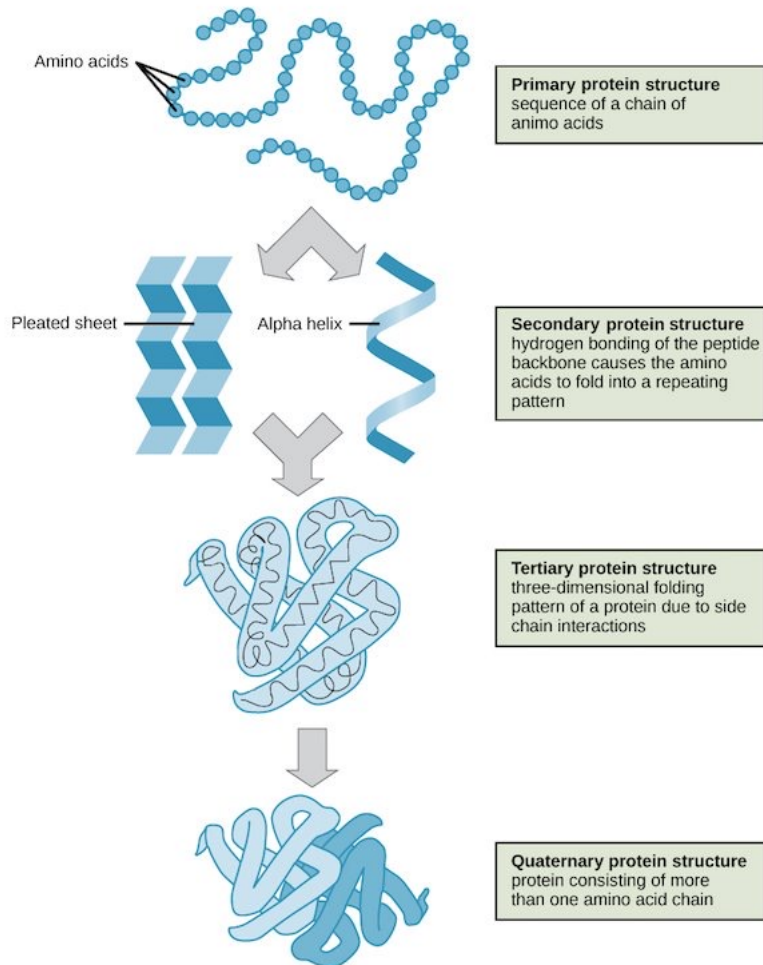


Insights Into the Role of Water in Drug Discovery: A Dual Perspective on Classical & Quantum Approaches

Daniele Loco, R&D Engineer in Quantum
Physics & Chemistry



A small step back: Proteins and Water



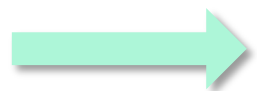
How is this related to Drug Discovery?

Drug Discovery



Search for new candidate medications (drugs)

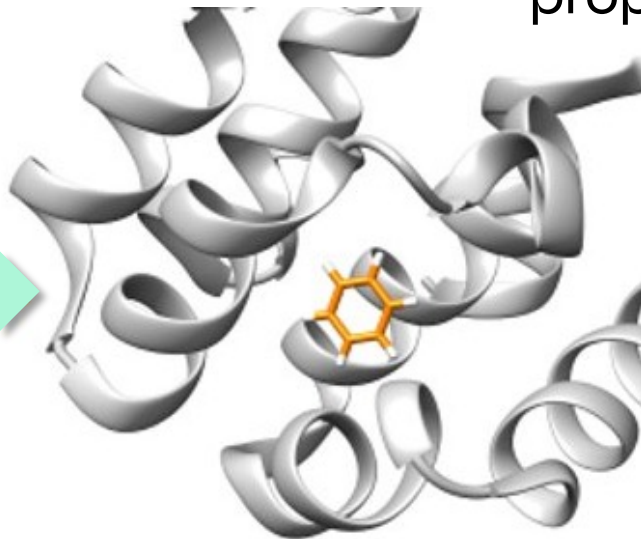
Structure Based DD



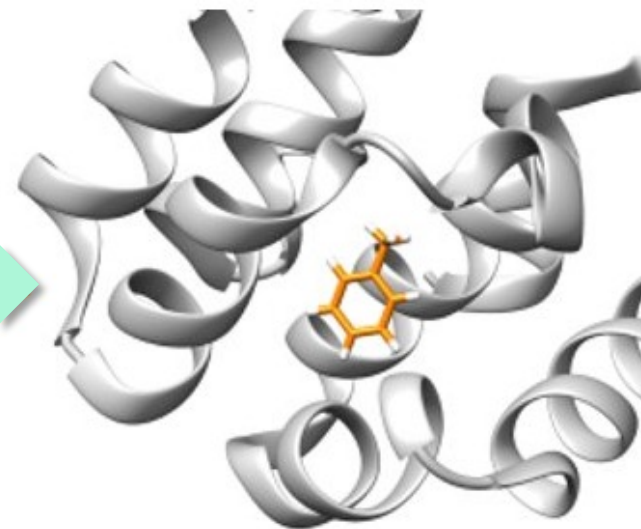
Target bio-system (e.g.: protein, DNA) molecular structure determines drug properties



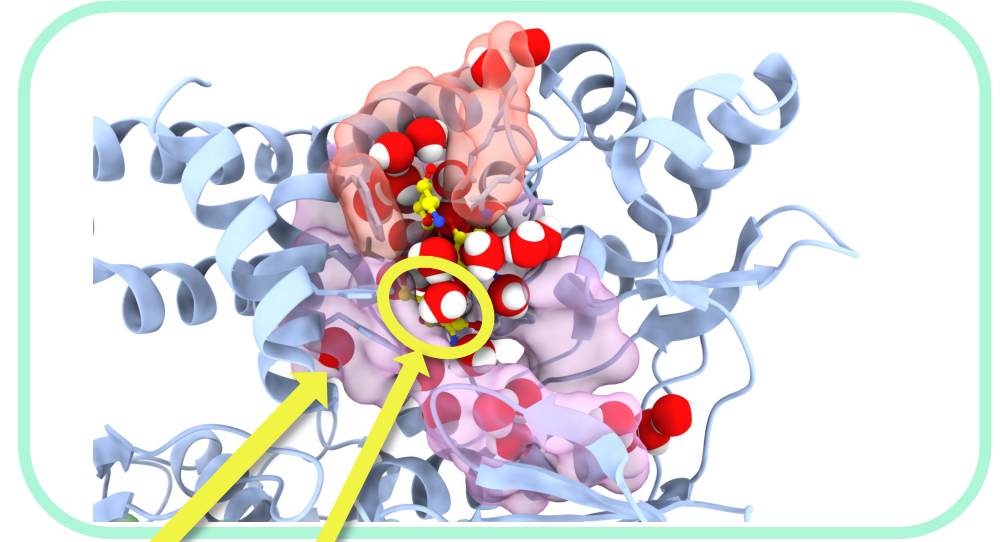
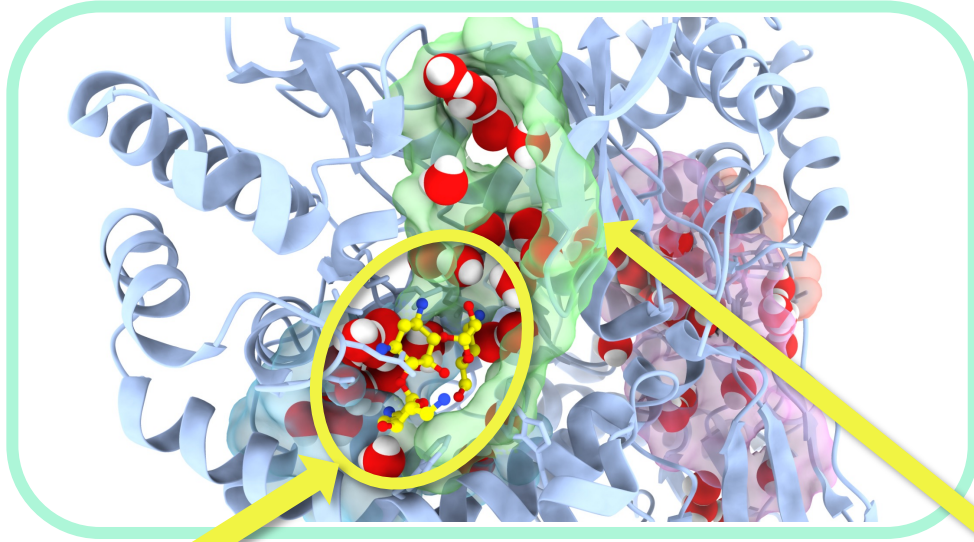
Candidate 1



Candidate 2



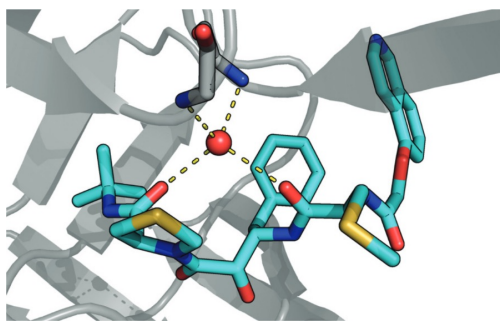
Where does water come into play?



Candidate

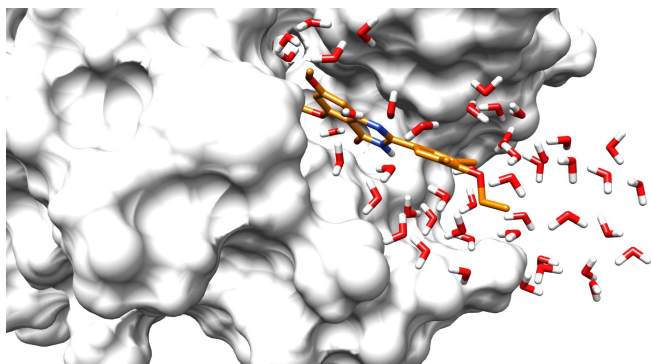
Inside Proteins Pockets
On the protein surface
Can be identified by experiments

Hydration sites prediction in protein pockets **for** structure-based drug discovery



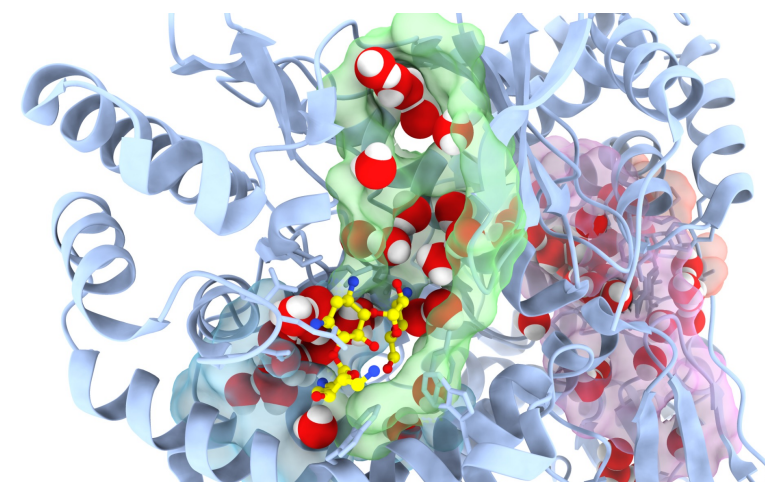
I. Mediating
ligand-protein
interactions

Crystal structure of HIV-1 protease in complex with the inhibitor KNI-272 (PDB: 1HPX)



II. Reorganisation of
solvent-protein, solvent-
ligand, solvent-solvent
interactions

Essex et al., Chem. Soc. Rev., 2021, 50, 9104



III. Overall complex stabilization
through extended interactions
network

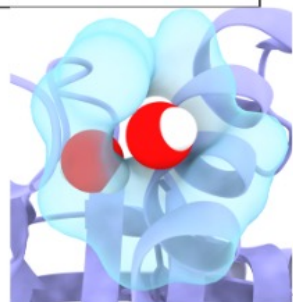
Classical methods: a heterogeneous world

Chem. Soc. Rev., 2021, 50, 9104–9120

Method	Interaction-Based Site Prediction	Free Energy	Ligand Docking	Knowledge-based
Description	Water binding locations based on suitable interaction models and spatial search <i>Water stability evaluated on a number of locations</i>	Binding free energy calculation for each water molecule <i>Often time-consuming</i>	To model the effect of water molecules on ligand binding during the docking to macromolecular targets	To cluster water positions from collection of aligned protein structures with some degree of sequence similarity
Selected Tools	Placevent Dowser++ WATGEN WaterDock GAsol gridSolvate	WATsite GIST WaterMap WaterKit SSTMAP	DeepWATsite DOCK-GIST	PyWATER

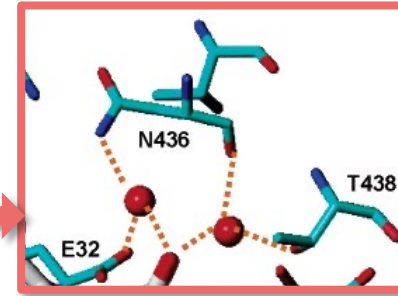
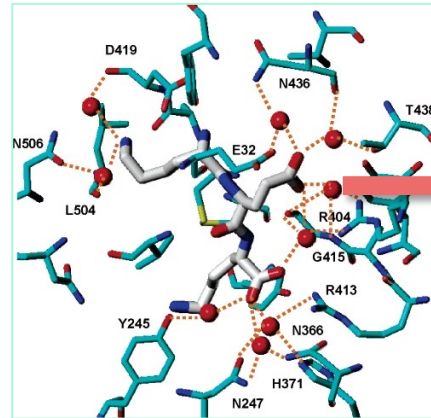
Combination of 3D-RISM; GAsol; WATsite

15 selected methods over ~30 reviewed in literature

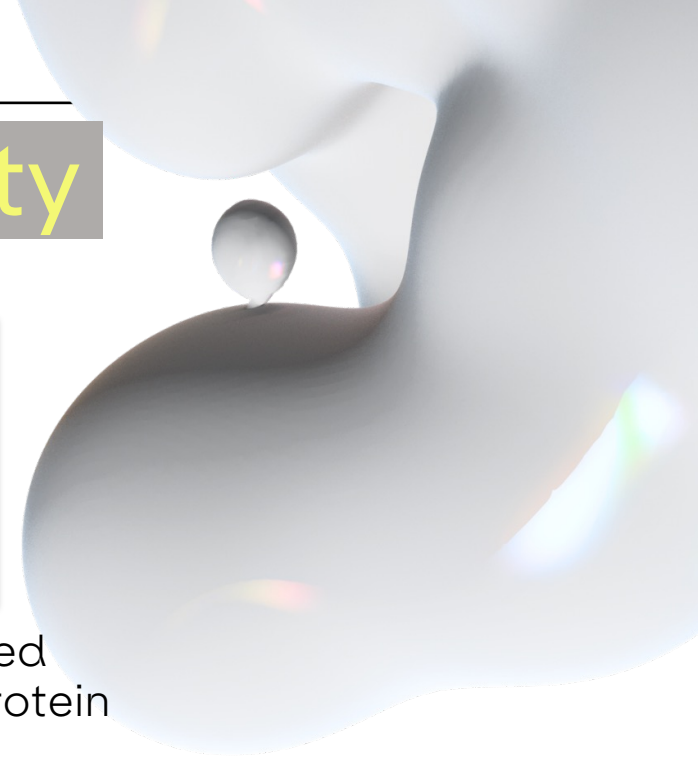


Molecular dynamics and water density calculations

Locate water networks interacting with protein:
- Where?
- How many?

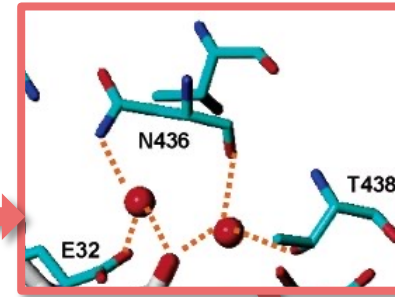
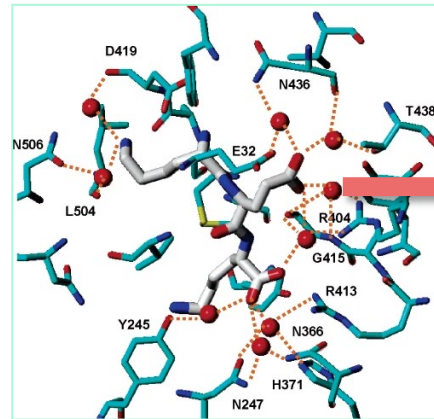


Water and estimated interactions with protein residues



Molecular dynamics and **water density calculations**

Locate water networks interacting with protein:
- Where?
- How many?



Water and estimated interactions with protein residues

Molecular Dynamics/ Monte Carlo

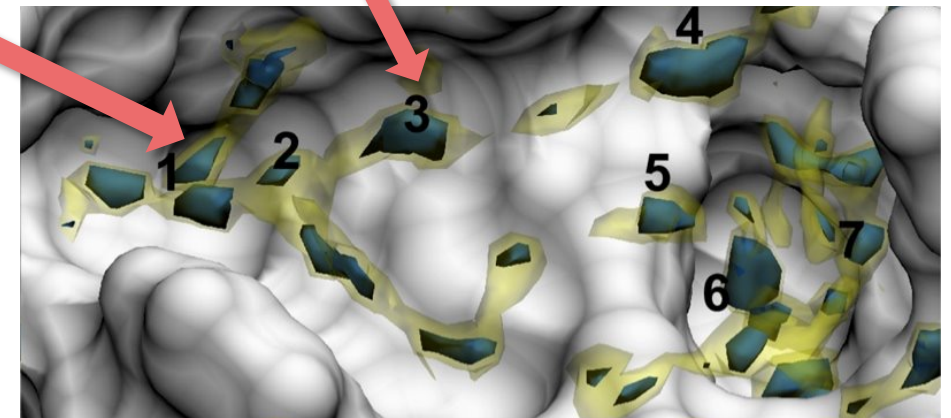
provide accurate predictions, but they can require extremely long simulation time, which are numerically expensive.

**Accurate &
Expensive Option**

Water density simulation

Continuum-like models computing a continuous distribution of water: **3D-RISM**.
Downside: lack of explicit positions of water molecules

**Faster but Partial
Solution**



Nguyen et al. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0219473>

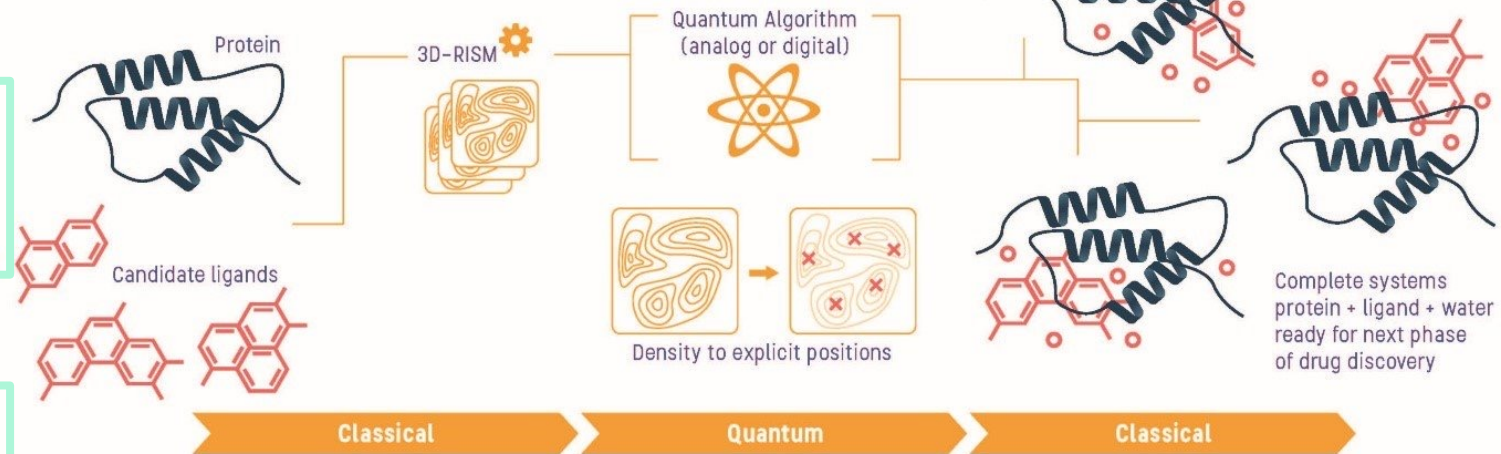
Hydration sites prediction in protein pockets for structure-based drug discovery

Water sampling prohibitive for large biological systems, while experiments can lack accuracy

Water prediction at ligand-protein interface can speed-up and enhance drug pipelines

Phase space sampling for highly dimensional problems has high complexity, suitable for a quantum solution

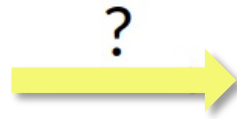
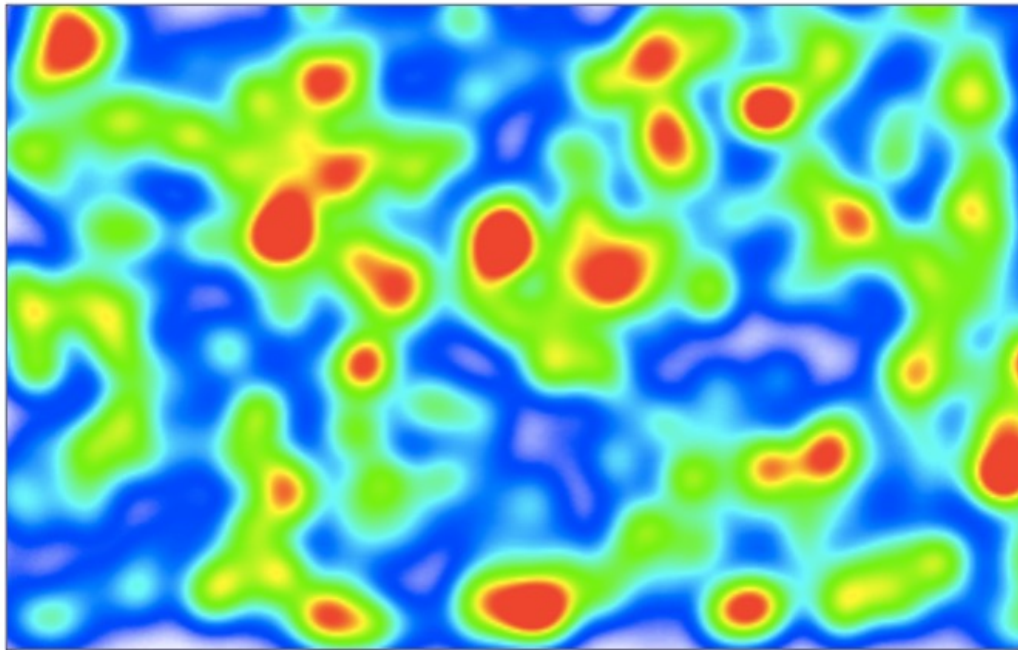
Protein Solvation Pipeline



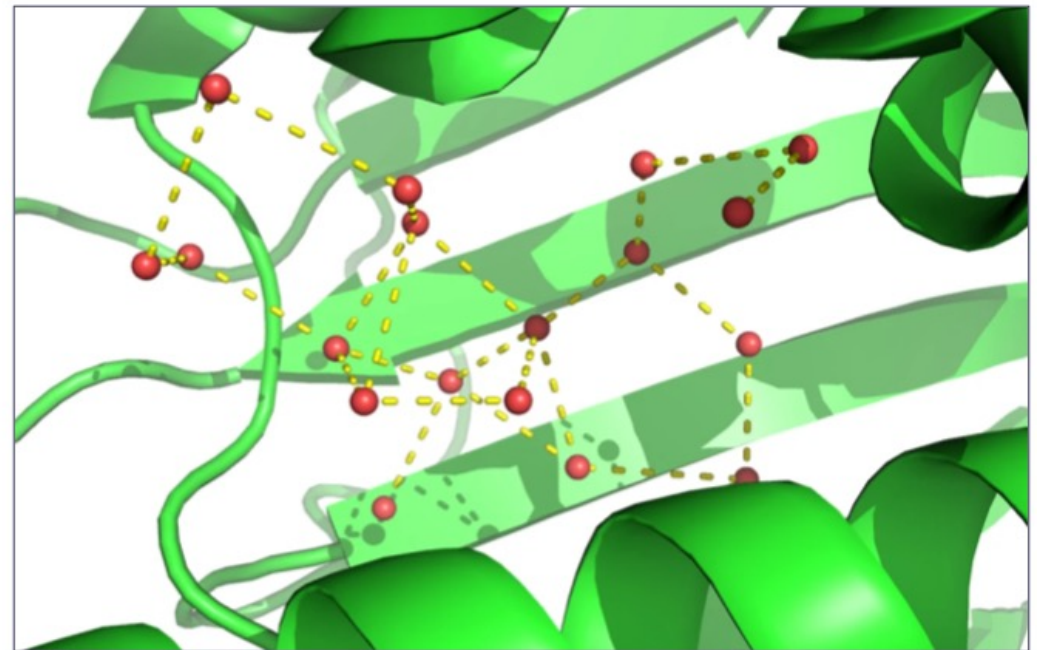
An Analog Quantum Computing Alternative

How do we get explicit water positions from a continuous probability density?

What 3D-IRSM gives us

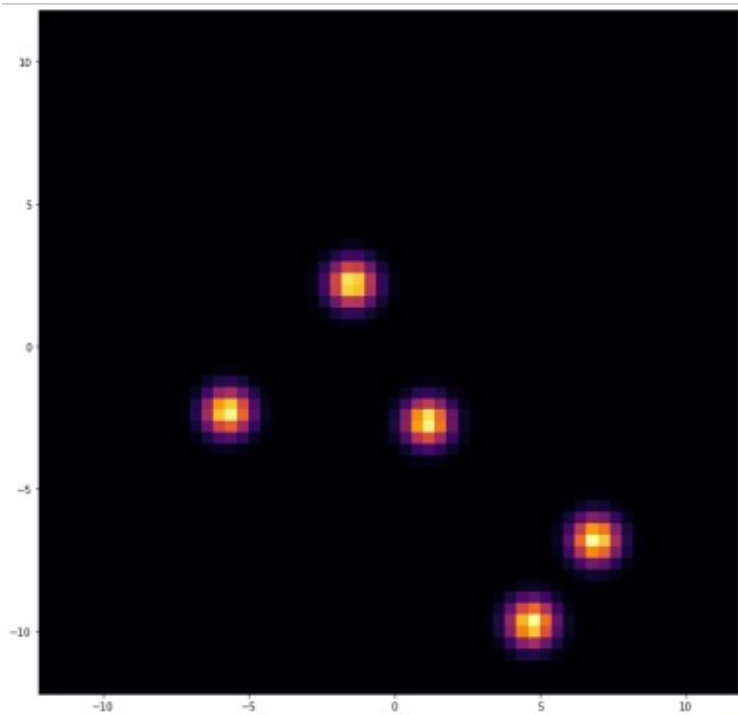


What we want

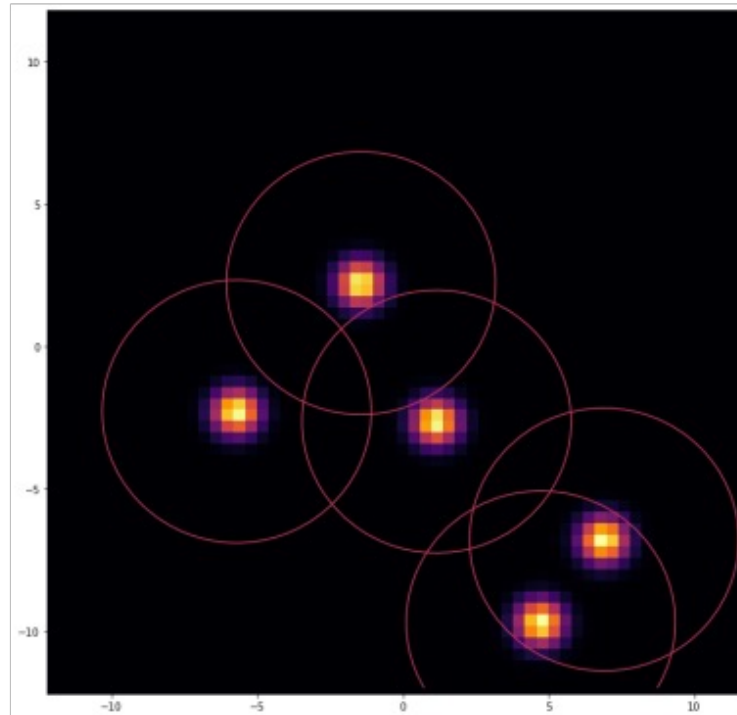


An Analog Quantum Computing Alternative

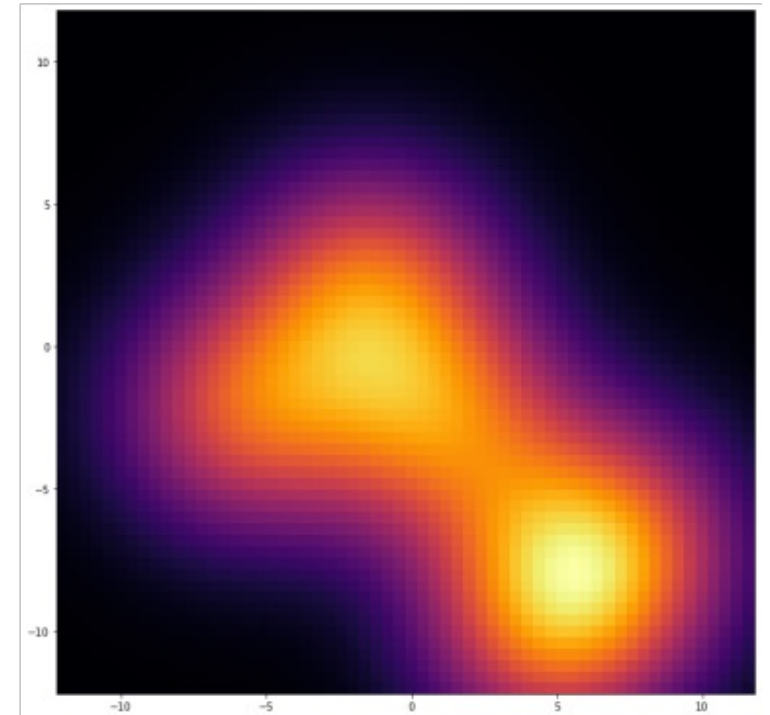
Propose a set of positions



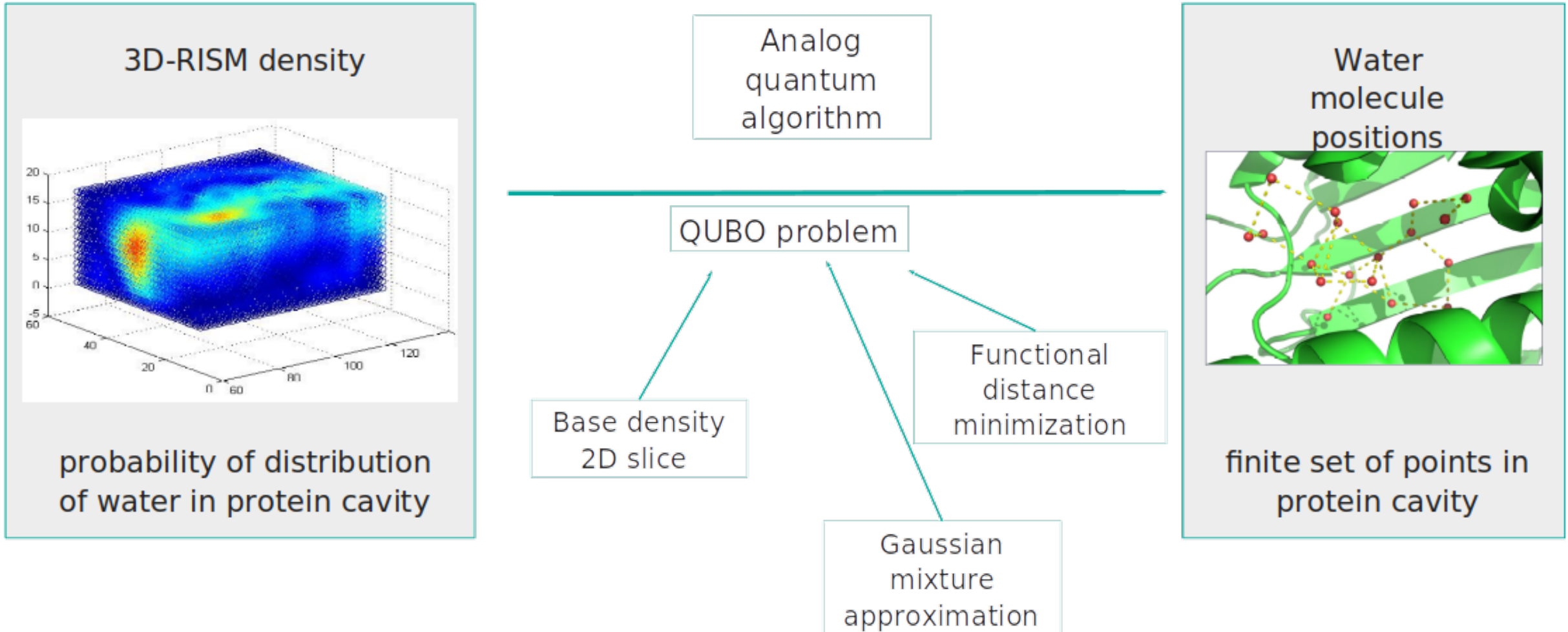
Put a distribution around each



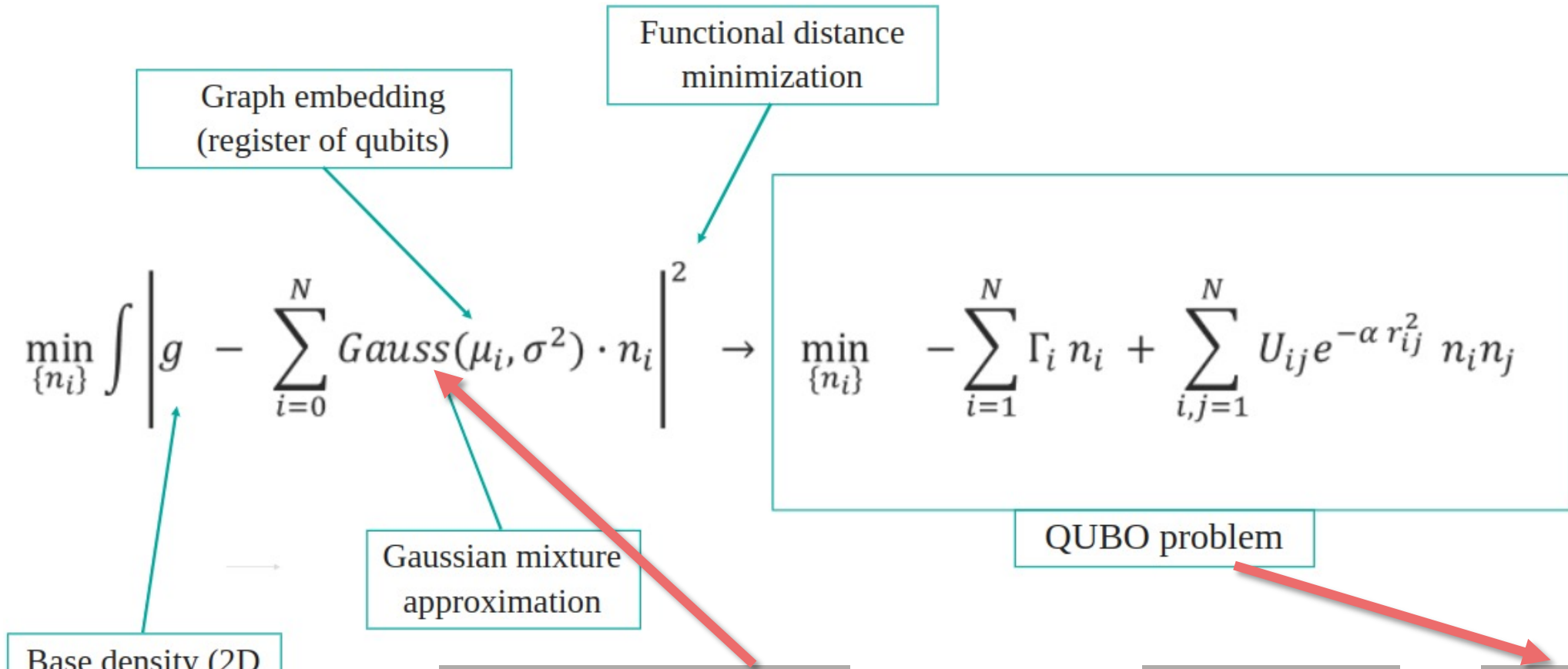
Computing the resulting sum



Analog Quantum Algorithm for Water Location



Optimization as a bridge between water location and the Quantum Machine



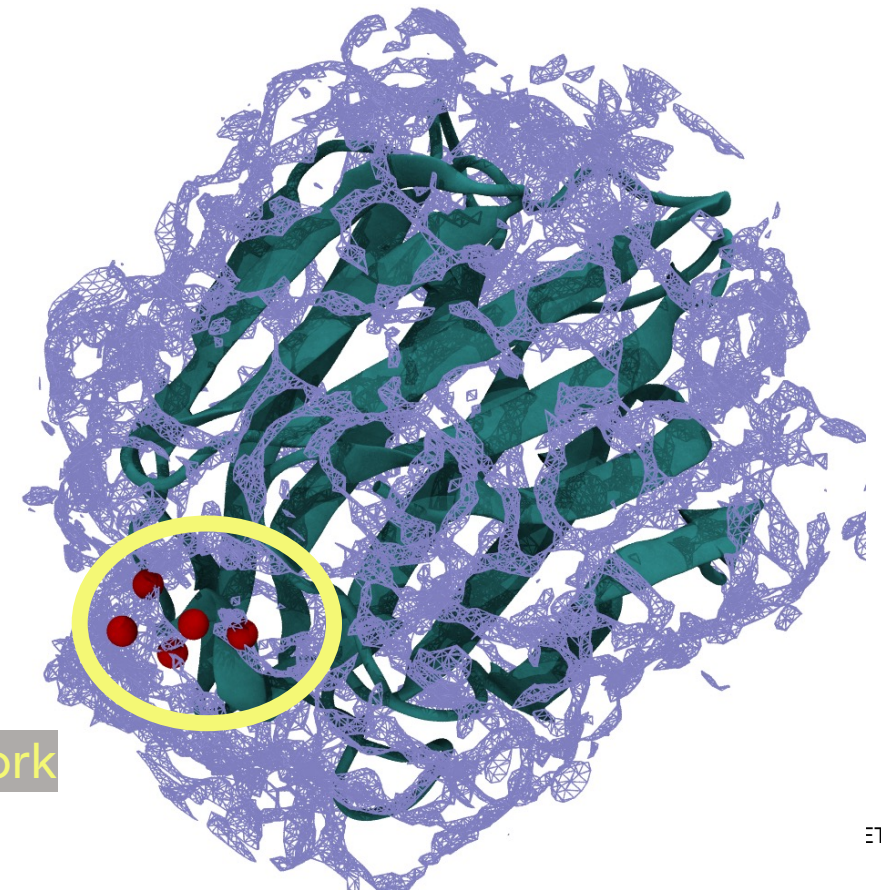
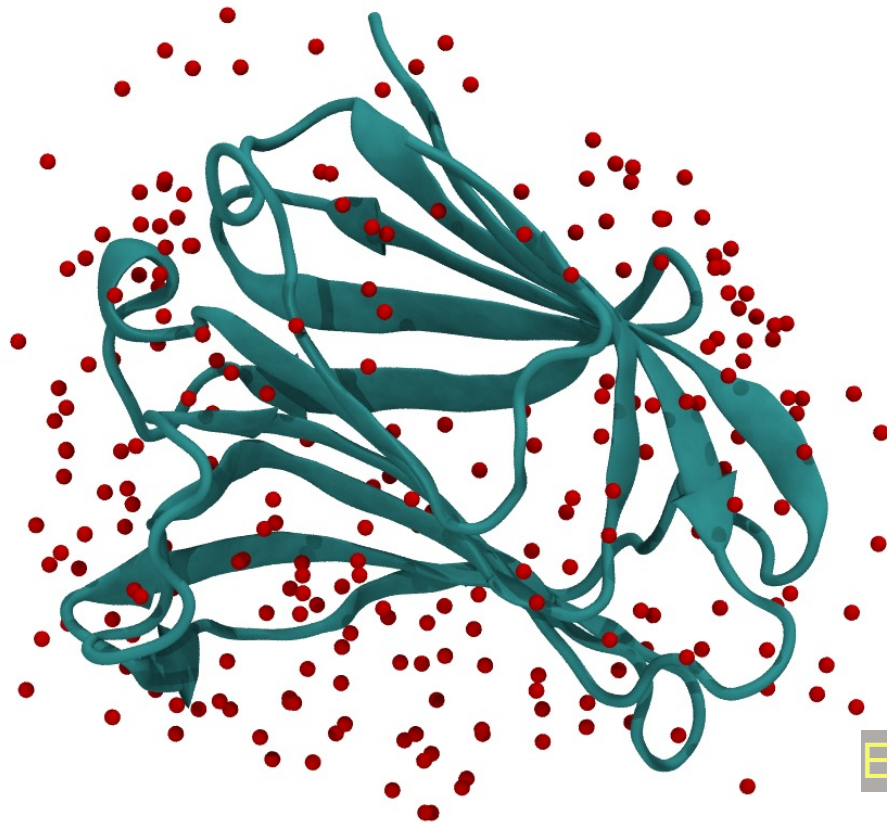
This way to write the problem allows the use of Rydberg atoms and their physics to evaluate water positions, given a reference density computed classically

WIP: Resources estimation and evaluation for advanced applications

Galectin protein (4wvv.pdb)



3D-RISM density

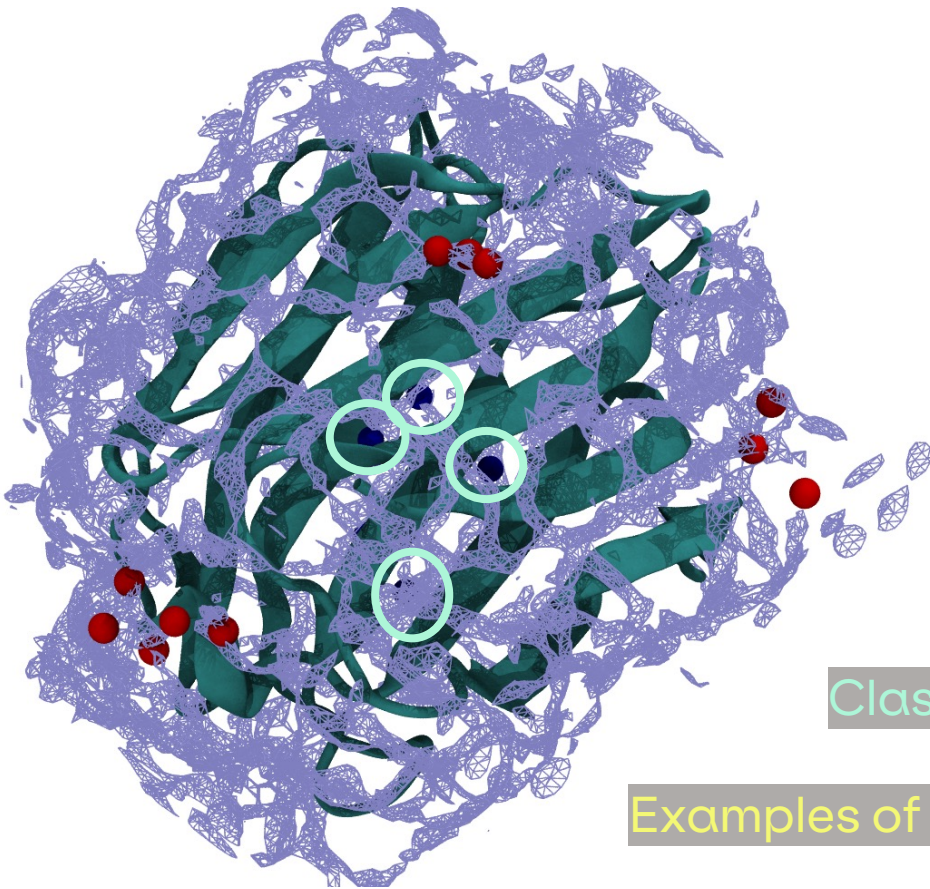


Example water network

WIP: Resources estimation and evaluation for advanced applications

Example classical water placement

Analog equivalent for a real-life application

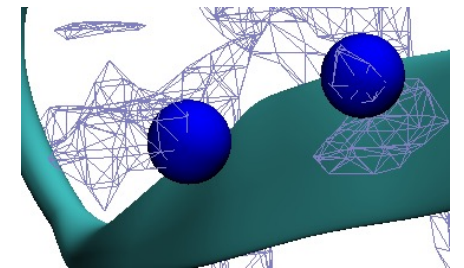
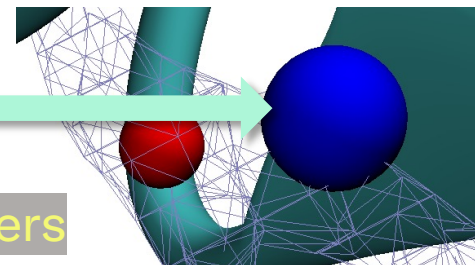


Map 3D space to qubit array:
 1 qubit = 1 potential water molecule
 Metric: assess simulation vs experimental measures

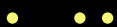
Estimate resources:
 ~20 Ang cube size x 2 qubits/Ang = **16000 qubits grid**

- Classical solution vs crystal clusters:
- relatively accurate = ~1.5 Ang distance
 - adding missing crystal water
 - limited in space.

Classical solution →
 Examples of crystal water clusters



Thank you for **your**
kind attention



Prochain atelier

Calcul quantique à basse consommation énergétique pour un développement durable

Krisztian Benyo

PASQAL



PASQAL

Journée Pack Quantique

ATELIER – Méthodes de calcul hybrides pour résoudre des problèmes d'optimisation combinatoire

Optimization combinatoire

- Trouver une solution optimale parmi un ensemble fini, mais large de façon prohibitive, d'options
- Un espace de solution de taille exponentielle, trop d'options à explorer

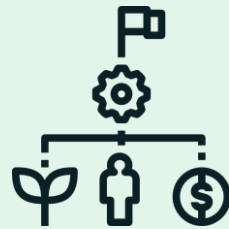


Optimization combinatoire



Chaîne logistique

Système optimal d'approvisionnement, de gestion des opérations, de logistique et de marketing



Allocation des ressources

Attribuer et gérer les actifs de manière à soutenir les objectifs de planification stratégique d'une organisation



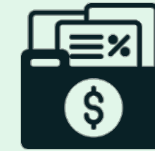
Conception de réseau

Prendre de meilleures décisions de conception qui auront des implications considérables



Planification

Commande optimale et coordination dans le temps de certaines opérations



Portefeuille

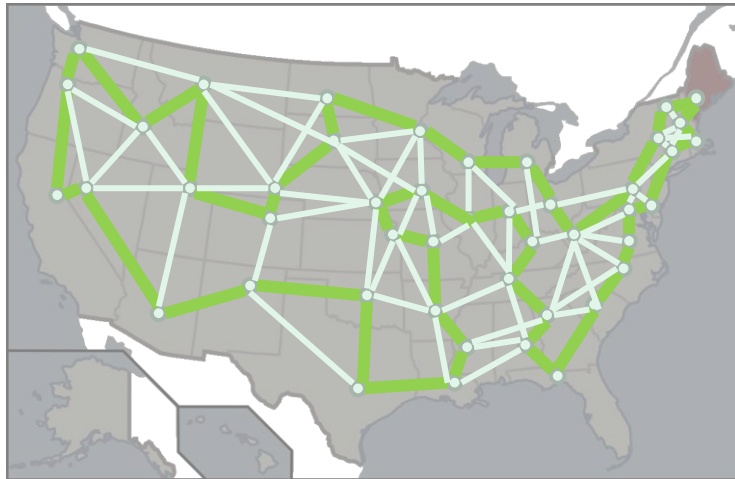
Maximiser le rendement attendu tout en minimisant les risques financiers

Problèmes sous forme de graphe

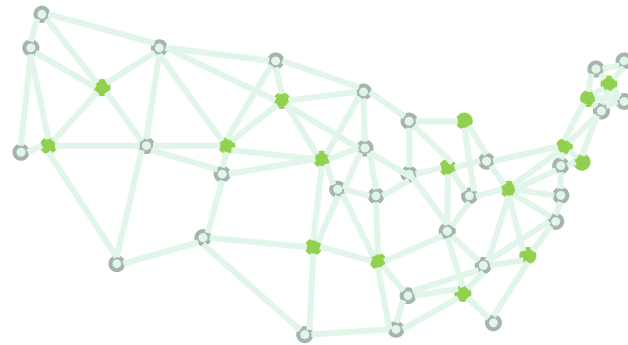
Qu'est-ce que c'est une '**graphe**' ?

- Des structures mathématiques pour modéliser des objets et des relations entre eux
- Sont constituées de sommets (points) liés par des arêtes (liens)

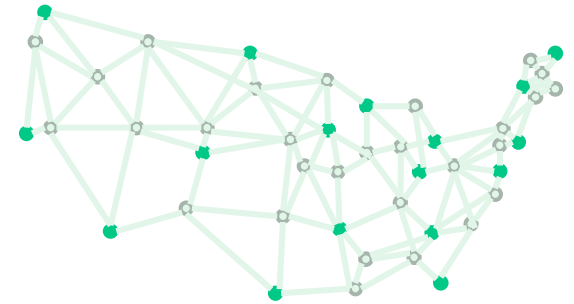
Il y a des liens intrinsèques entre des problèmes combinatoires et des problèmes sur graphes.



Find an itinerary which visits every location while minimizing total distance



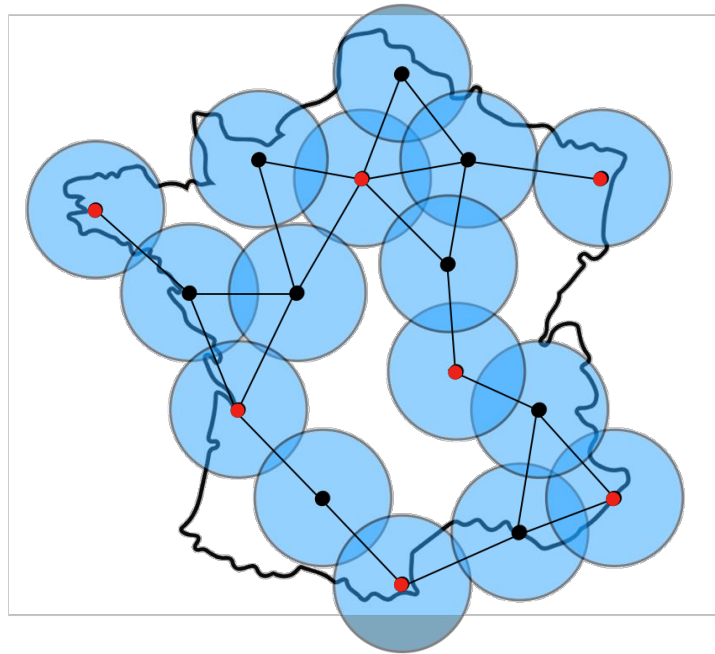
Find bipartition z that maximizes the number of edges which are "cut" (one vertex in each set)



Find the largest set z of vertices subject to constraint that no two are adjacent

Encoder des problèmes de graphe sur un QPU à atômes neutres

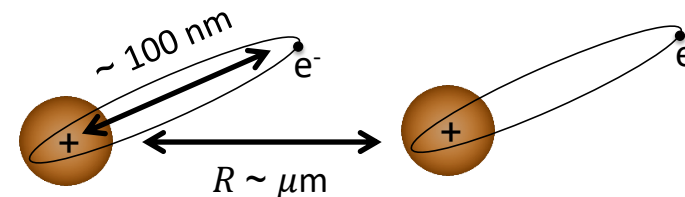
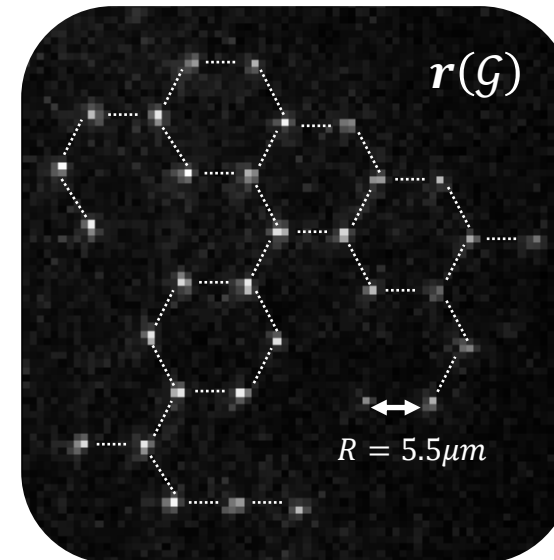
Les sommets sont les atomes



Topologie du graphe

$$H_G = \sum n_i n_j$$

Les arêtes sont des interactions (dipôle-dipôle)



Coloration des graphes

Let's see why cold atoms are so hot right now!

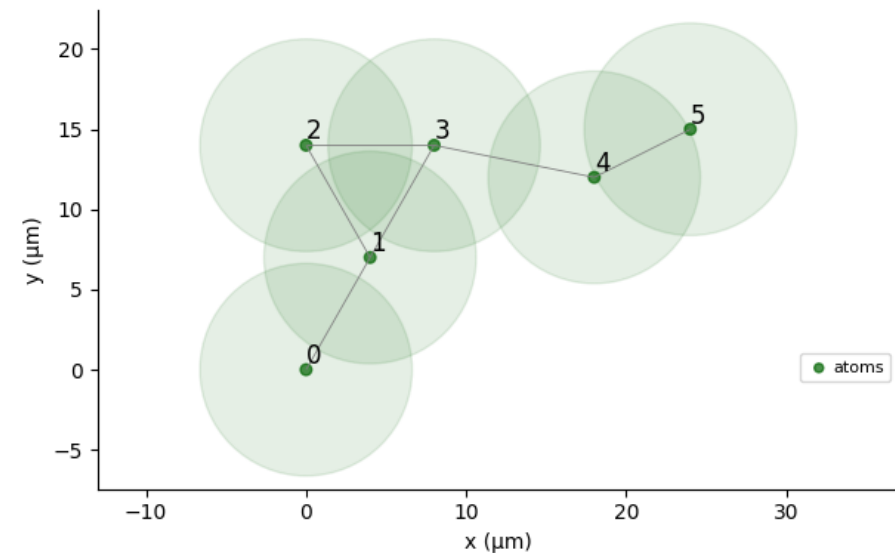
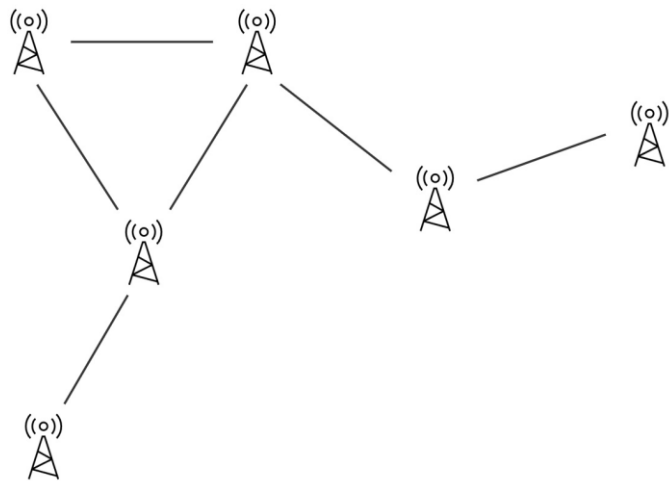


Maximum Independent Set

Un ensemble indépendant (**independent set**) d'un graph est un sous-ensemble de sommets tel que chaque pair de sommets n'a pas d'arête entre eux

Un ensemble indépendant maximale (maximum independent set ou MIS) est un ensemble indépendant de taille maximale dans un graph donné.

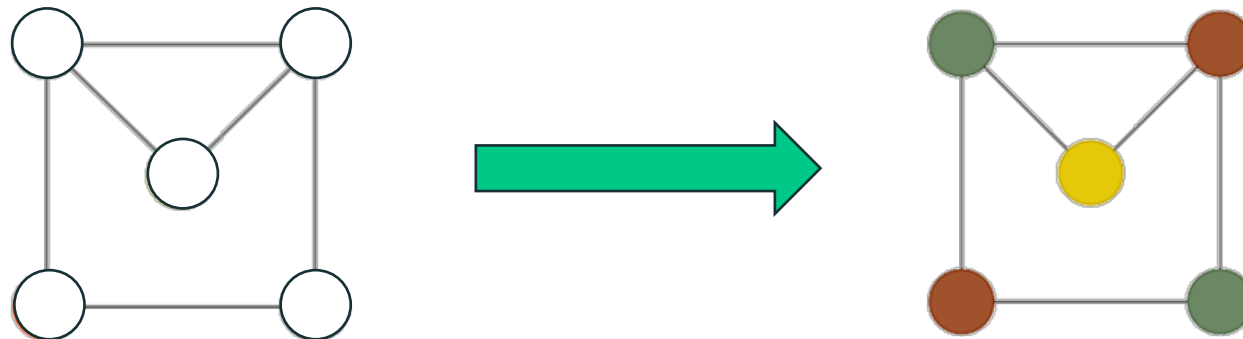
Les dynamiques de Rydberg peuvent être utilisées pour encoder les contraintes d'indépendance pour un registre atomique, modélisé par un graph unit-disk



Coloration des graphes

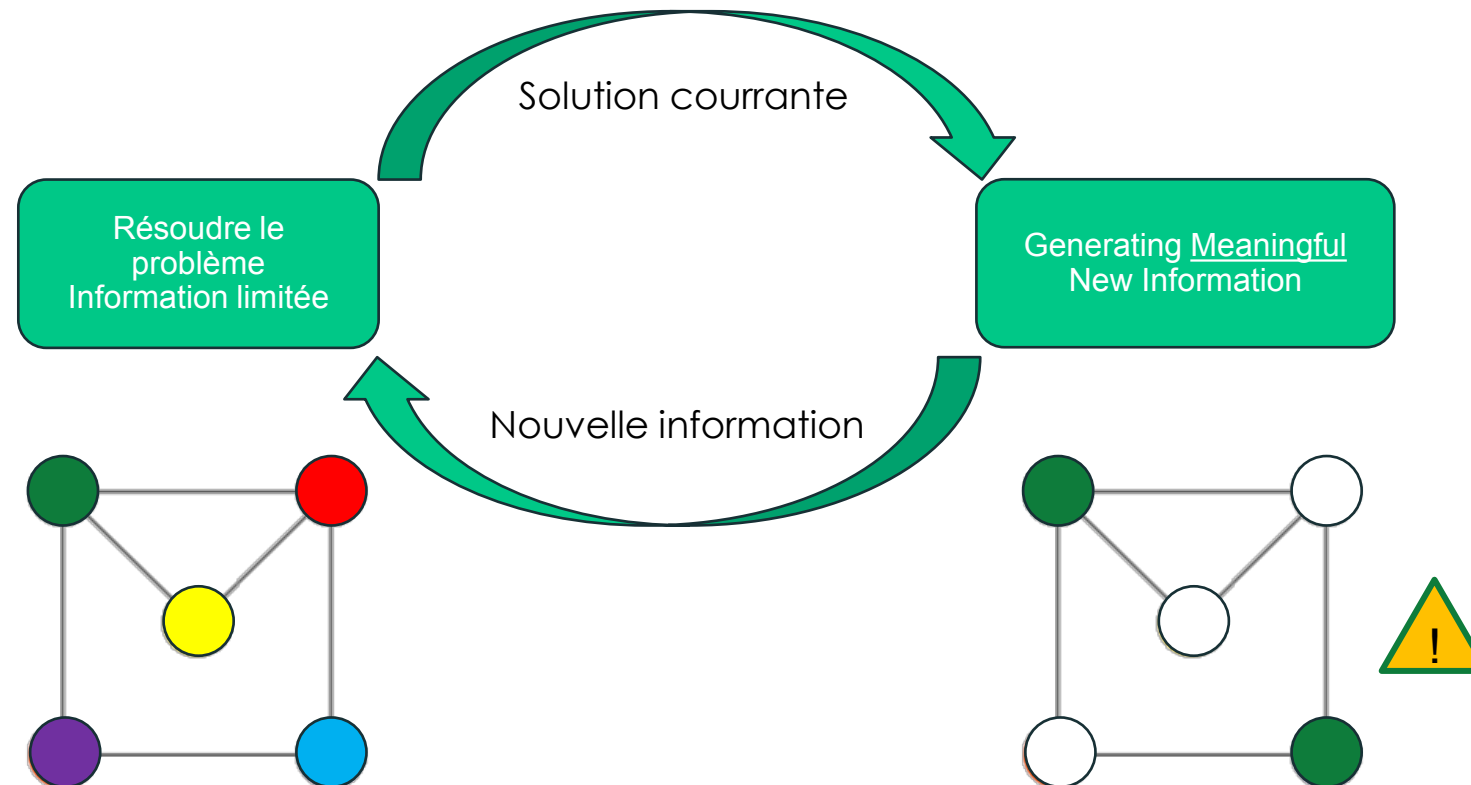
L'objectif c'est

- Colorer tout les sommets du graphe avec un nombre minimal de couleurs
- Les sommets d'une arête ne peuvent pas avoir la même couleur



Coloration des graphes

- La méthode de décomposition nous permet de diviser le problème en deux parties :
1. Master Problem: Résoudre un problème simplifié avec de l'information limitée
 2. Sub-Problem: Générer de la nouvelle information utile au Master Problem



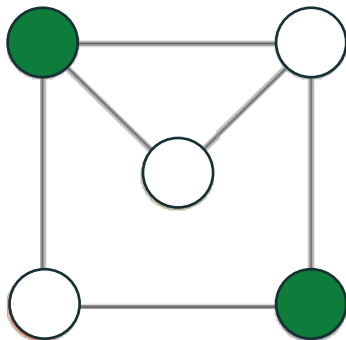
Le verrou : Générer de la nouvelle information est classiquement difficile

Génération Classique

Le Sub-Problem est souvent aussi difficile à résoudre que le problème originel

Générer de la nouvelle information est lente et coûteuse en ressources de calcul

Il est compliqué de garantir l'utilité de la nouvelle information générée

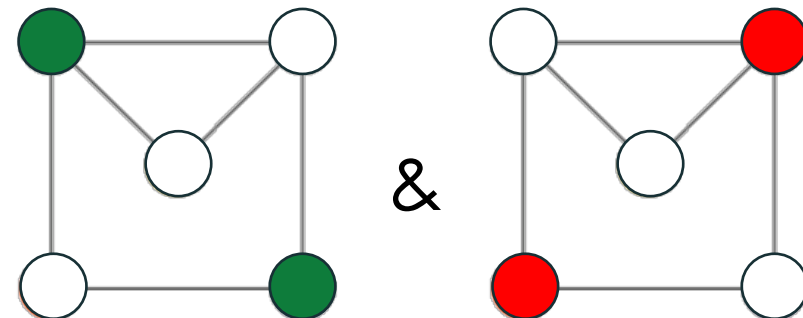


Génération quantique

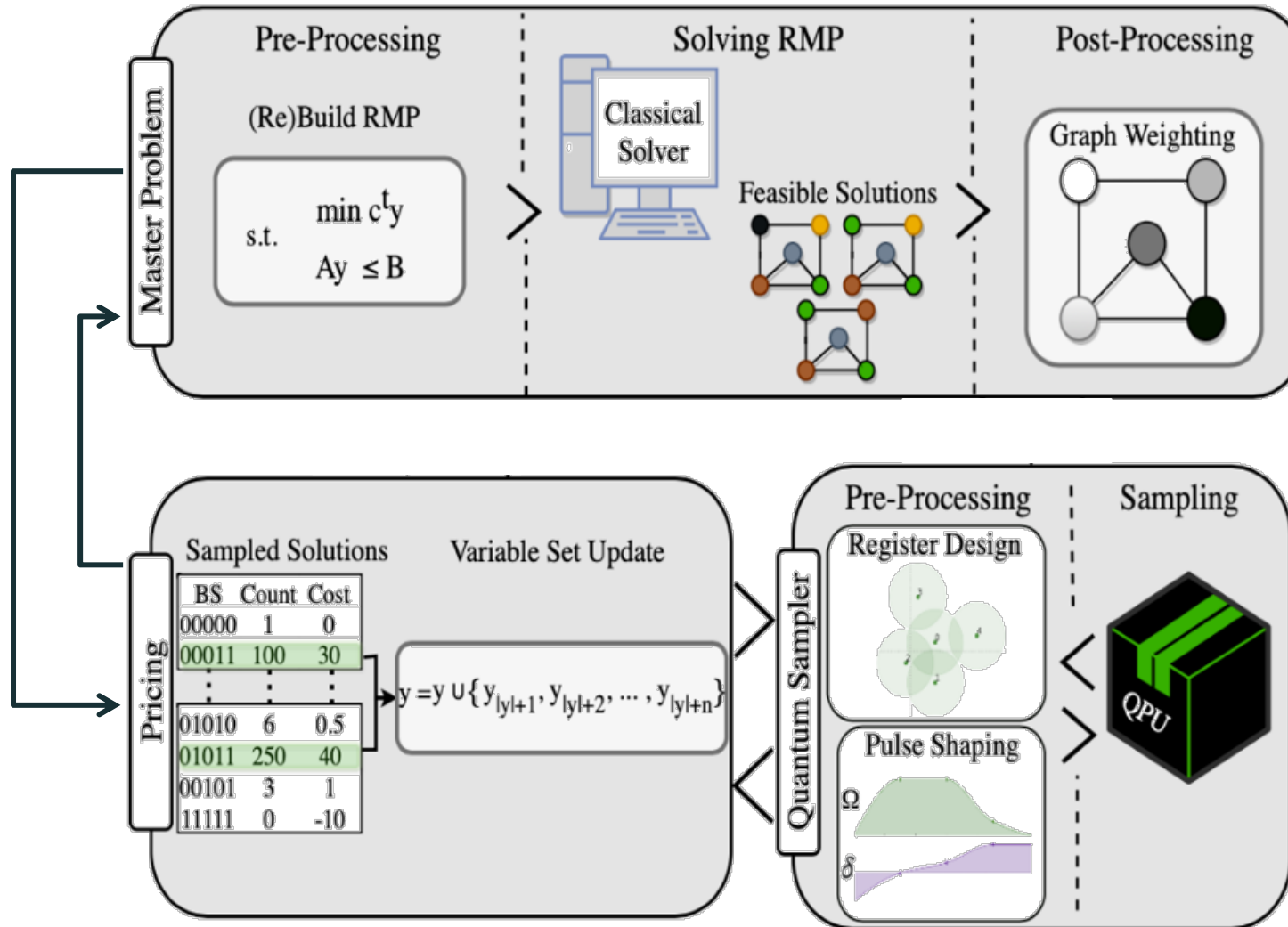
La taille du Sub-Problem est plus petit donc des méthodes hybrides / quantiques sont faisables

Il est possible de générer plusieurs nouvelles informations dans une seule itération, ce qui accélère l'algorithme

Il est facile de garantir l'utilité de l'information générée



Méthode de génération de colonnes



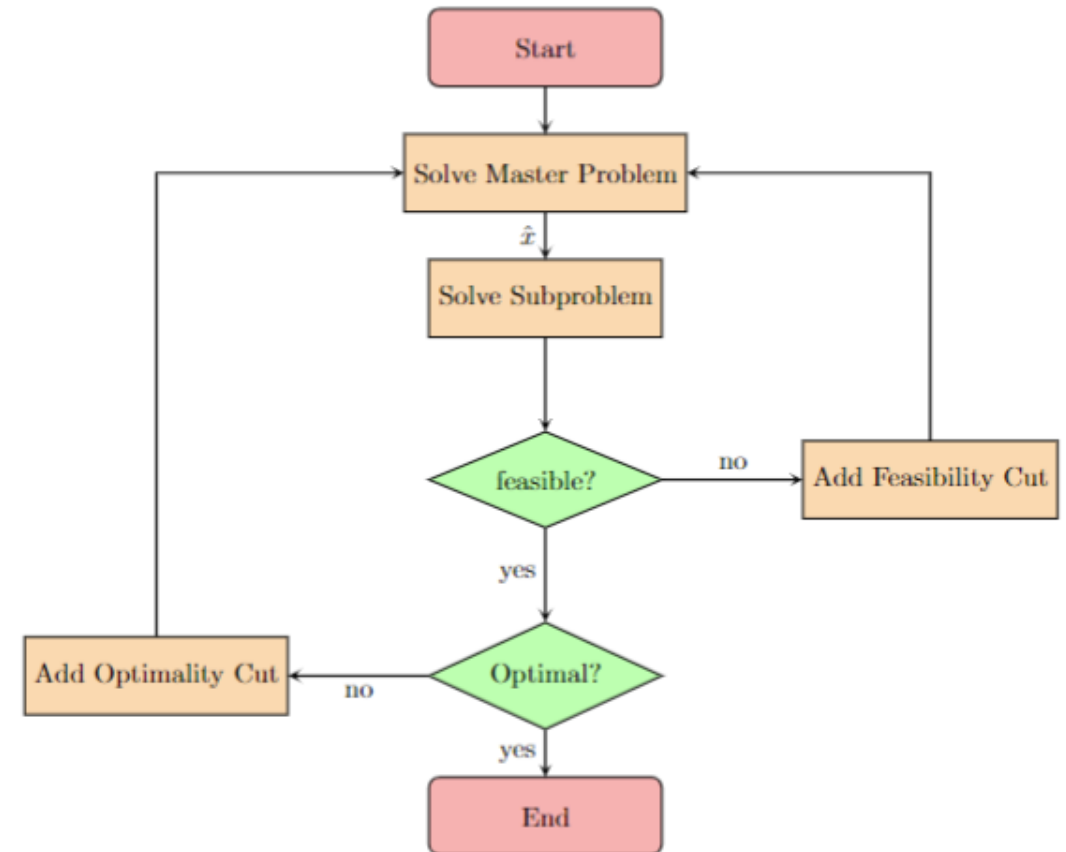
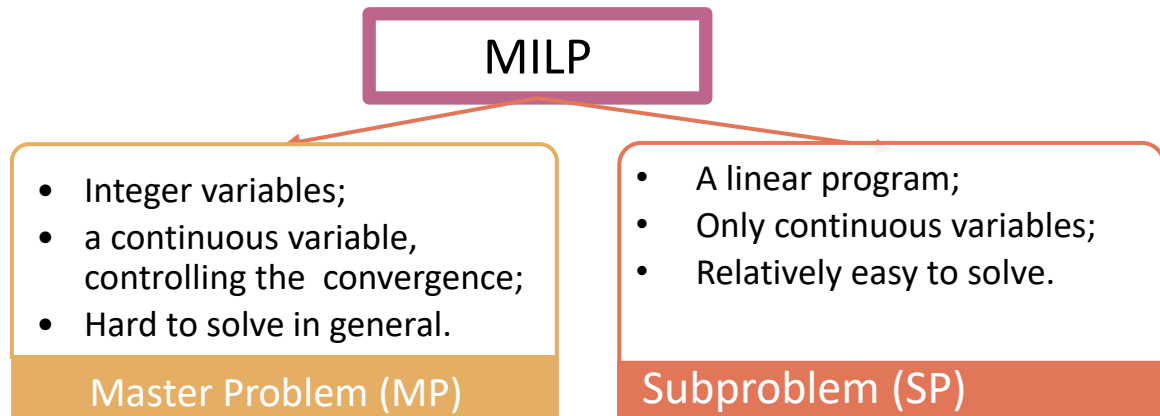
Calcul classique

- Trouver la meilleure coloration parmi un ensemble de combinaisons (variables) réduit
- Créer des instances pour le sous-problème
- Exécuter les algorithmes de création de register atomiques et de design de sequence de pulse

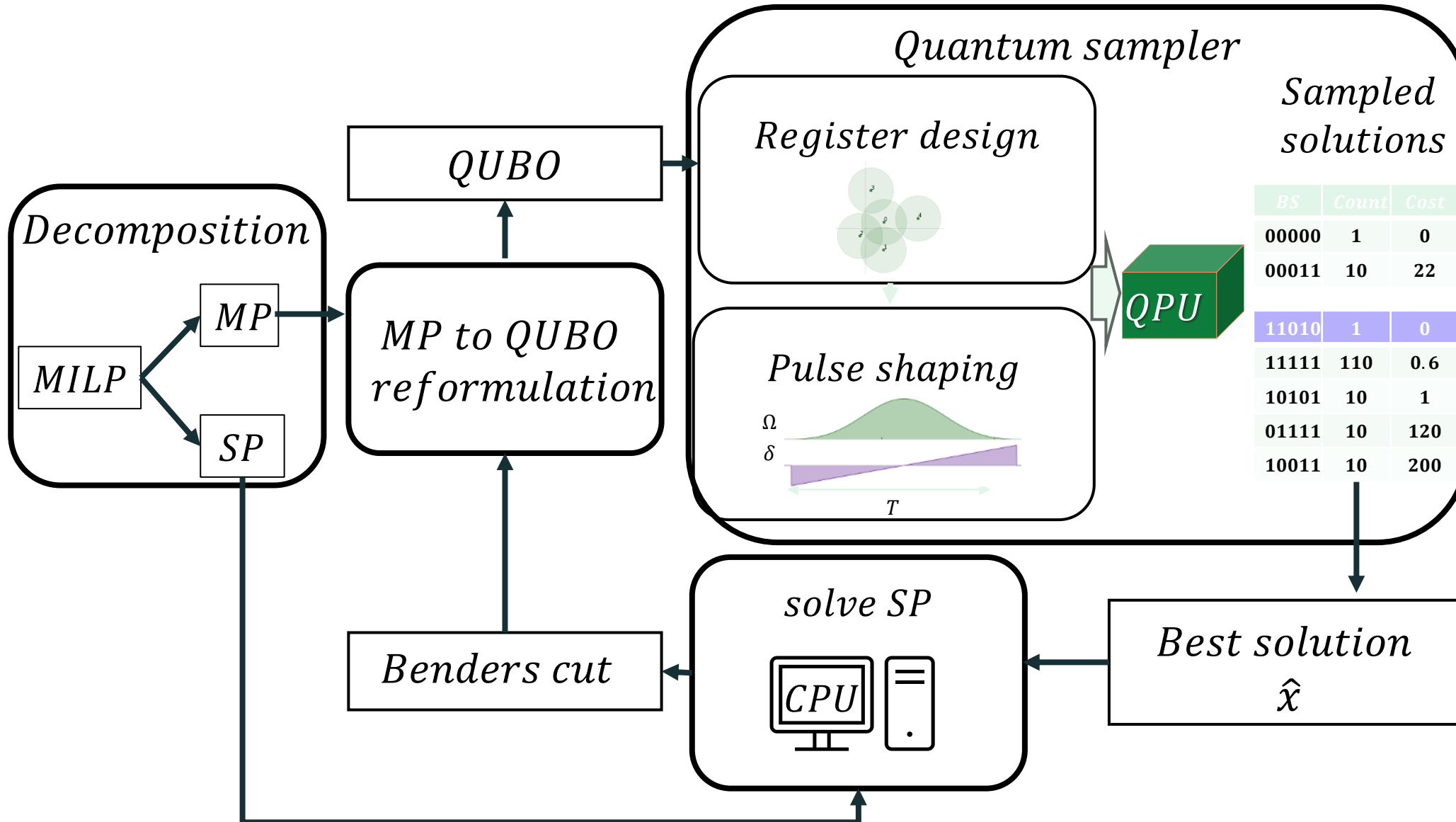
Calcul quantique

- Faire des échantillons de solutions admissibles pour chaque sous-problème
- Enrichir le problème master avec des Nouvelles configurations (variables)

Mixed Integer Linear Programming



Décomposition de Benders



Branch and Bound

Une méthode standard pour résoudre des problèmes d'optimisation combinatoire

Branch: Diviser le problème en plusieurs sous-problèmes

Bound: Eliminer certaines branches selon des critères (pruning - tailler)

Notamment des bornes inférieures et supérieures sur l'espace de recherche

Construire une arbre :

- La racine est la graphe complète
- Pour chaque sommet, on cherche un ensemble MIS et on lui associe une branche
- Pour chaque branche on associe une couleur et on le retire du graphe

Chaque Sommet de l'arbre correspond à :

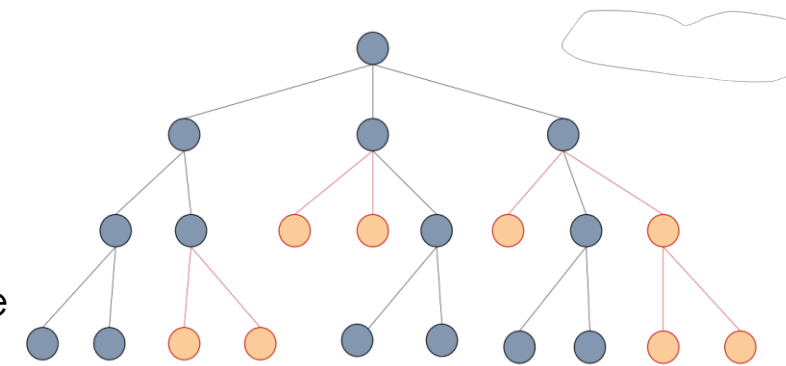
Un (sous-)graphe induit

Une couleur correspondante

Des bornes inférieures et supérieures sur les meilleures colorations atteignables à partir de ce sommet

Tailler l'arbre : retirer des sommets où on n'observe pas d'amélioration ou bien où il y a des scénarios non-faisables

L'exploration de l'arbre est réalisé avec un score de priorité



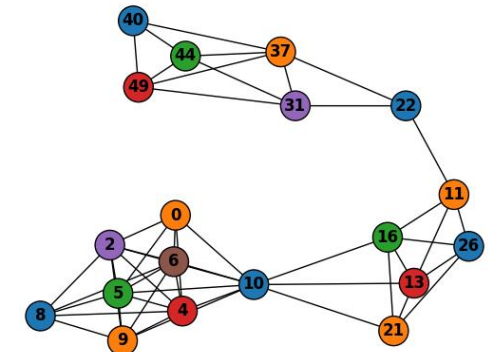
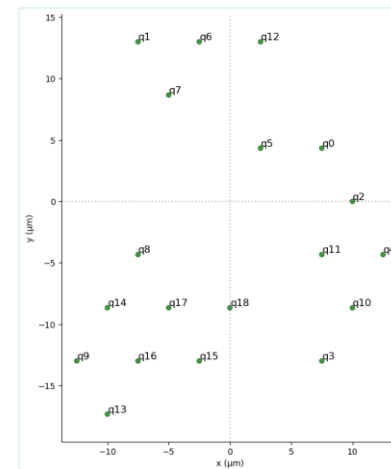
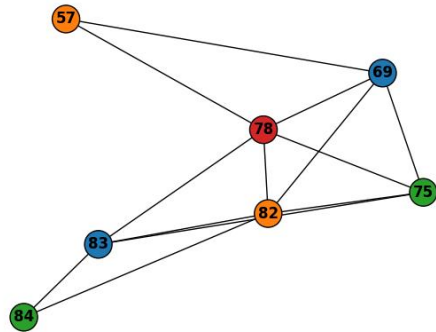
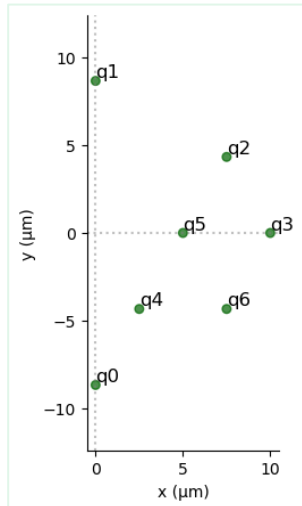
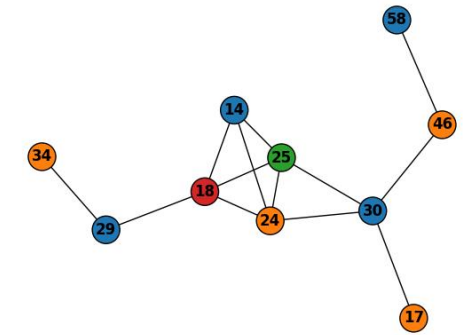
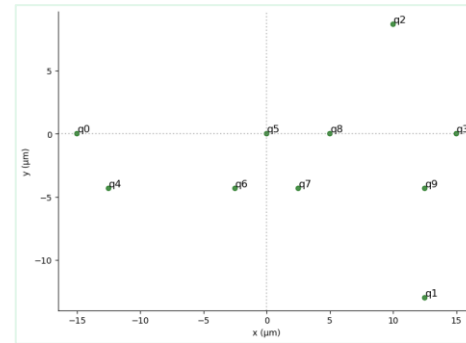
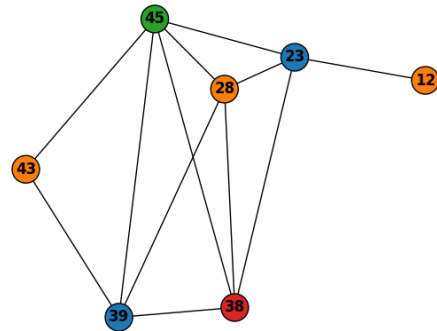
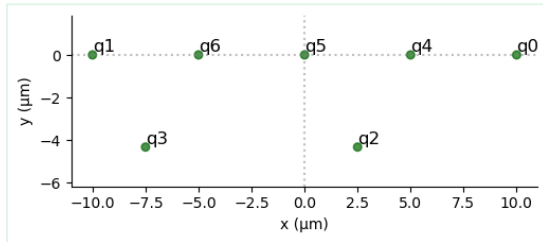
Pruning the B&B tree to reduce the number of nodes to be explored

Quelques résultats

4 graphes: 7, 7, 10 et 19 qubits

Pour chaque sommet BB environ 25 iteration d'optimization QAOA (avec 75 shots) et une échantillon finale de (110 shots).

Chaque instance a générée la solution optimale



D'autres résultats

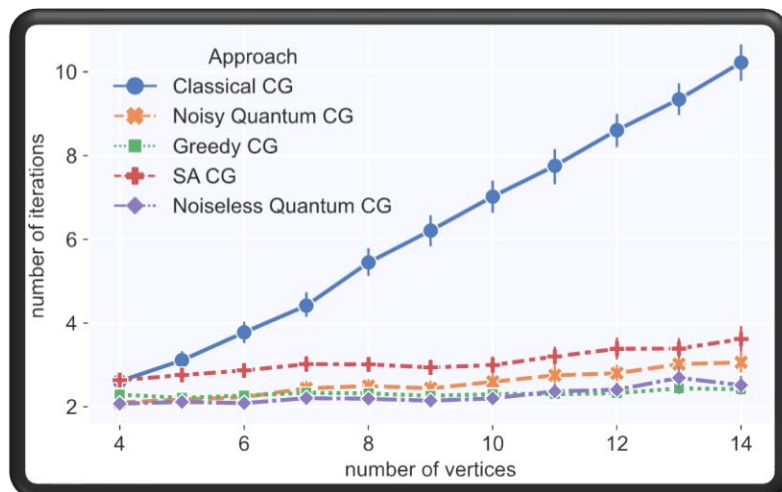
Comparison de nos résultats hybrids avec des références classiques

- 🌀 Solution Classique exacte: toujours la meilleure solution pour chaque itération
- 🌀 Heuristique State-of-the-art: peut fournir plusieurs résultats optimales

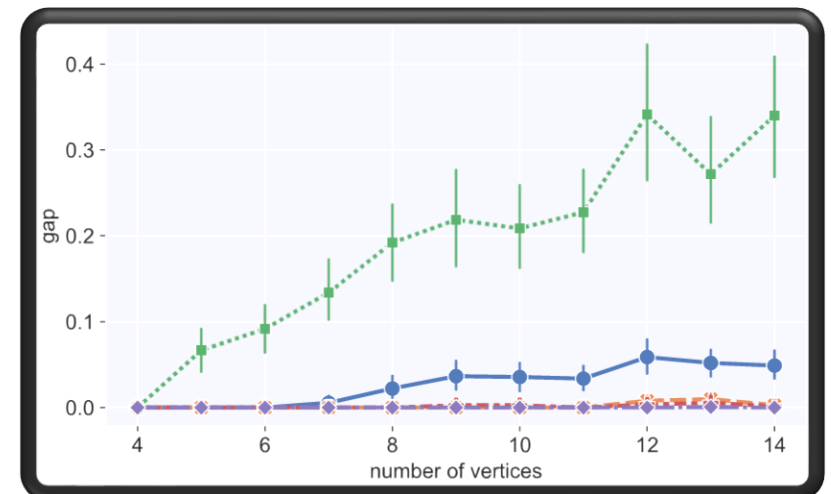
Notre méthode hybride indique les meilleures performances

- 🌀 Il est capable de fournir de meilleures résultats que le heuristique : jusqu'à 80 % de moins de couleurs utilisées
- 🌀 Il est plus rapide que des méthodes classiques : jusqu'à 6 fois plus rapide que les solveurs exactes

Nombres d'iterations qui génère des nouvelles options

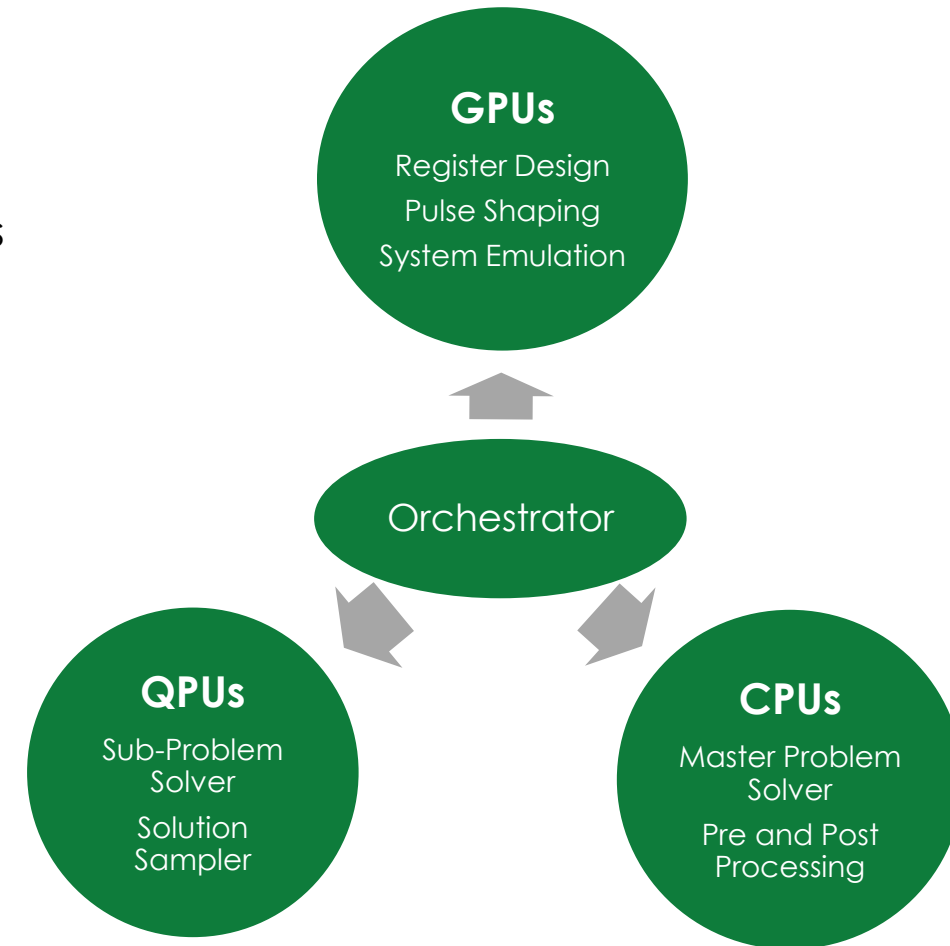


Distance de la solution optimale



Conclusions

- Des ordinateurs classiques (CPUs et GPUs) jouent toujours un rôle important dans la résolution des problèmes combinatoires
 - Aide à optimiser les paramètres des QPUs
 - Nécessaire pour du pre- et post-processing des données quantiques
 - Peut résoudre de façon efficace certaines étapes des algorithmes
 - Des outils utiles pour tester des idées et des modèles jouets
- Des ordinateurs quantiques peuvent résoudre de façon plus efficace certaines classes de problèmes
 - Peut fournir de l'information critique sur le problème
 - Peut compléter des ordinateurs classiques dans la résolution des problèmes complexes
 - Cibler de façon efficace les verrous de l'algorithme





SEMINAIRE PACK QUANTIQUE

MERCI A TOUTES ET TOUS !

EDF LAB PARIS-SACLAY