

Sujet de thèse

Algorithmes quantiques de clustering de données par réseaux de neurones sur architecture hybride multi-CPU - multi-QPU

Stéphane Vialle (CentraleSupélec - LISN) & Damien Rontani (CentraleSupélec - LMOPS)

2025-2028

Thématique : Algorithmique et programmation quantique et distribuée de réseaux de neurones

Domaines : Informatique, Informatique Quantique, Intelligence Artificielle, Informatique distribuée

Résumé du projet de thèse

Les réseaux de neurones peuvent se mettre en œuvre sur des processeurs quantiques actuels (NISQ) notamment à l'aide de circuits quantiques paramétrés et d'un algorithme quantique variationnel (VQA). Le circuit quantique est alors configuré par un jeu de paramètres qui sont en général des angles de portes de déphasage, et appliqué successivement aux différentes données à chaque *époque* du réseau de neurone. A la fin de chaque époque la partie CPU de l'algorithme variationnel calcule l'évolution des poids du réseau de neurones et en déduit les nouveaux paramètres à lui appliquer pour la prochaine époque. Cette approche fonctionne mais demande de nombreuses exécutions du circuit quantique sur le QPU, qui sont aujourd'hui (et pour des années) des machines chargées et peu rapides. L'objectif de cette thèse est d'explorer diverses approches, cumulables, pour améliorer les résultats de réseaux de neurones sur architectures hybrides multi-CPU – multi-QPU et accélérer leurs temps de calculs, pour des tâches de clustering de données.

Pour améliorer les résultats de ces clustering de données on peut notamment :

- Développer les réseaux de neurones quantiques les plus adaptés aux problèmes de clustering et aux types de datasets considérés, pour des exécutions sur plusieurs QPUs [1,2]. La topologie des circuits utilisés, leur profondeur et leurs schémas d'intrication peuvent être fortement limités par les architectures réelles visées.

Pour réduire leurs temps d'exécution plusieurs solutions existent :

- Créer un macro-circuit quantique en utilisant plus de qubits pour répliquer le circuit initial [3]. On peut alors traiter en parallèle plusieurs données. La profondeur du circuit n'augmente pas, mais utiliser plus de qubits peut quand même engendrer plus de bruit dans le QPU. Un compromis est à trouver pour chaque QPU.
- Distribuer la partie CPU de l'algorithme variationnel sur plusieurs ressources de calcul et appeler un QPU différent depuis chaque processus. La partie CPU de l'algorithme neuronal doit ensuite assembler les mesures obtenues sur les différents QPU pour reconstituer les résultats globaux d'une époque de l'apprentissage et en déduire l'évolution globale du réseau neuronal. Cette étape peut se faire en suivant un algorithme distribué synchrone (tous les QPUs doivent avoir fourni leurs résultats aux CPUs avant que tous ne passent à l'époque suivante), ou asynchrone (un CPU commence l'époque suivante dès qu'il a reçu les résultats d'une partie des QPUs) [4]. Un algorithme asynchrone permet de ne pas ralentir quand un ou plusieurs QPU sont plus chargés, mais la convergence du réseau de neurones peut être plus lente et demander plus d'époques.

Ce sujet de thèse consiste donc à explorer conjointement ces différentes voies algorithmiques hybrides (classiques et quantiques) de réseaux de neurones appliqués à du clustering de données, pour concevoir, implanter et expérimenter du clustering de données rapide et de bonne qualité sur des architectures distribuées multi-CPU - multi-QPU.

Objectifs :

- Concevoir et implanter des algorithmes quantiques réalisant des clusterings de données à la fois rapides et de bonne qualité, à partir d'algorithmes variationnels distribués synchrones et asynchrones, et de circuits quantiques parallélisés de réseaux de neurones.
- Utiliser un environnement permettant des exécutions sur simulateur ou sur vraies machines quantiques (ex : Quiskit) afin de mener des expérimentations multi-CPU – multi-QPU, avec des simulateurs de QPU et de vrais QPU bruités (architectures NISQ actuelles).
- Analyser la qualité du clustering (avec des métriques classiques de ML) et les vitesses et accélérations obtenues en utilisant plusieurs QPUs, pour atteindre au moins la même qualité de clustering que sur un seul QPU et sur un seul CPU.
- Identifier les algorithmes les plus prometteurs sur les architectures quantiques actuelles bruitées (NISQ) et celles en cours de conception moins bruitées et moins limitées (FTQC).

Déroulement prévisionnel du travail de thèse :

Un double état de l'art sur les méthodes de clustering de données par des réseaux de neurones sur architectures quantiques, et sur la distribution d'algorithmes variationnels sur de multiples QPU permettra de débiter le travail de thèse. En parallèle un apprentissage ou un perfectionnement dans un environnement de développement quantique comme Qiskit permettra de tester des algorithmes simples sur un seul QPU.

Plusieurs algorithmes quantiques et distribués de clustering par réseaux de neurones seront ensuite conçus et évalués sur simulateurs pour différents ensembles de données. Les plus prometteurs seront implantés sur des machines quantiques réelles en fonction de leurs disponibilités. En particulier, une machine quantique digitale sera bientôt disponible en France au Très Grand Centre de Calcul (TGCC) géré par le CEA et accessible à de tels travaux de recherche, et diverses machines quantiques d'IBM sont librement accessibles à travers Internet (mais pour des durées limitées).

Une identification des performances et limites de ces algorithmes sur les architectures quantiques actuelles, et une estimation de leurs dépassements sur les futures architectures quantiques, termineront ce travail de thèse.

Des publications jalonneront cette recherche ainsi qu'une participation aux divers forums d'informatique quantique de Paris-Saclay. Des collaborations internationales devraient émerger de ce travail, comme avec l'institut de recherche Riken (Japon) lors des thèses précédentes d'informatique quantiques menées dans l'équipe ParSys.

Enfin, des réunions hebdomadaires auront lieu avec les encadrants de thèse, pour discuter de lectures d'articles, de conceptions d'algorithmes, d'implantation hybride et d'analyses de résultats et performances. Les rédactions d'articles feront aussi l'objet de rédactions collaboratives, par des discussions, et par l'utilisation d'outils de rédaction partagée.

Résultats attendus :

- Des algorithmes hybrides de clustering de données sur architectures distribuées multi-CPU – multi-QPU.
- Des codes quantiques implémentant les algorithmes conçus, et des résultats expérimentaux en simulation et sur architectures réelles.
- Des analyses de qualité de clustering et des mesures et estimations de gains vis-à-vis d'algorithmes hybride mono-CPU – mono-QPU
- Des publications internationales en conférence et en revues.

Contexte et environnement de la thèse :

L'équipe ParSys du laboratoire LISN travaille depuis longtemps en Calcul à Haute Performance (HPC) et en calcul quantique (QC). Depuis 2018 elle mène des recherches en HPC appliqué à l'Intelligence Artificielle et au clustering de données, et depuis 3 ans en *Quantum Machine Learning*. De manière complémentaire, le laboratoire LMOPS mène des recherches en photonique et traitement quantique de l'information, sous-jacentes à l'informatique quantique.

D'autre part, CentraleSupélec travaille avec une importante communauté de partenaires industriels, et participe à des études industrielles en informatique quantique depuis 4 ans. Plusieurs collaborations durables se construisent actuellement sur ce thème, auxquelles participent les encadrants de cette thèse.

C'est dans ce contexte de recherche académique en Informatique Quantique, et de partenariats industriels, que s'inscrira cette thèse.

Références

- [1] J. Rauch, S. Vialle, D. Rontani. Generative-Based Algorithm for Data Clustering on Hybrid Classical-Quantum NISQ Architecture. 37th GI/ITG International Conference on Architecture of Computing Systems (ARCS 2024). Potsdam, Germany (2024).
- [2] J. Wu, Z. Tao, Q. Li. wpScalable Quantum Neural Networks for Classification. 2022 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE). Seattle, USA (2022).
- [3] J. Rauch, B. Chichereau, S. Vialle, P. Carribault, D. Rontani. Investigating parallel execution of quantum Machine Learning circuits on superconducting hardware. Q-SET-2024 workshop, in QCE-2024. Montreal, Canada (2024).
- [4] L. Becker, B. Goullet De Rugy, M. Nadalin. Distribution of a quantum learning algorithm on QPU cluster. Master thesis, CentraleSupélec (2025).