

Internship proposal – Master (M1 or M2) – 4 or 5 months

Quantum methods for probabilistic learning

Keywords: Machine learning, small data, Fokker-Planck equation, quantum methods, high-dimensional.

Abstract:

Machine learning is now a central tool in theoretical chemistry, applied mathematics, and engineering. However, many machine learning approaches rely on large datasets, whose generation can be prohibitively expensive when each data point requires demanding numerical simulations or experiments. This project focuses on **probabilistic learning on manifolds**¹, an approach designed to characterize high-dimensional parameter spaces using only a limited number of sampled realizations. The method is based on the construction of an **Itô stochastic differential equation** whose stationary distribution reproduces the available data. By studying the non-stationary solutions, one can explore the geometry of the parameter space and define the underlying manifold¹.

In practice, this problem can be formulated as an eigenvalue problem for the **Fokker-Planck equation**. Its numerical solution, however, suffers from the **curse of dimensionality**, a challenge well known in quantum mechanics. To overcome this limitation, we reformulate the Fokker-Planck eigenproblem as a **time-independent Schrödinger equation**², making it possible to leverage numerical and quantum-inspired methods originally developed for quantum physics. Recently, we proposed an approach based on the **Variational Quantum Eigensolver (VQE)**², which is particularly suited to the current **Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ)** era³. The main objective of this Master's project is to perform **reference classical calculations** that will serve as benchmarks for this emerging quantum computing strategy.

The student will join an active research project at the interface of **machine learning and quantum mechanics**. The work will involve implementing numerical solvers for low-dimensional models and applying existing quantum or quantum-inspired algorithms to address higher-dimensional problems⁴. Continuation into a PhD program is possible.

Prerequisites: Basic knowledge in solving partial differential equations. Coding/programming skills. Ability to read and understand scientific papers in English is required. Strong mathematical skills.

Methods: Numerical differentiation. Linear algebra. Numerical eigenvalue problems.

Estimated dates: 02/2026 – 07/2026

Contact:

Loïc Joubert-Doriol, Maître de Conférences (Associate professor)
Laboratoire Modélisation et Simulation Multi-Echelle (MSME), Université Gustave Eiffel
e-mail: loic.joubert-doriol@univ-eiffel.fr

References:

1 Soize & Ghanem: *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **432**, 117453 (2024). 2 Soize, Joubert-Doriol, & Izmaylov: *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **443**, 118080 (2025). 3 Tilly *et al.*: *Phys. Rep.* **986**, 1 (2022). 4 Gatti *et al.*: *Applications of quantum dynamics in chemistry*. Vol. 98. Heidelberg: Springer, 2017.

Méthodes quantiques pour l'apprentissage probabiliste.

Mots-clés : Apprentissage probabiliste, équation de Fokker-Planck, méthodes quantiques.

Résumé :

L'apprentissage automatique est aujourd'hui un outil central en physique, chimie et ingénierie. De nombreuses approches reposent sur de **grands ensembles de données**, dont la génération peut être prohibitive lorsque chaque point de données nécessite des simulations numériques ou des expériences coûteuses. Ce stage se concentre sur **l'apprentissage probabiliste sur des variétés**¹, une approche conçue pour caractériser des espaces de paramètres de **haute dimension** en utilisant un **nombre limité de réalisations échantillonnées**. La méthode repose sur la construction d'une **équation différentielle stochastique d'Itô**, dont la distribution stationnaire reproduit les données disponibles. En étudiant ses solutions non stationnaires, il est possible d'explorer la **géométrie de l'espace des paramètres** et de définir la variété sous-jacente¹.

En pratique, ce problème peut être formulé comme un **problème aux valeurs propres pour l'équation de Fokker-Planck**. Sa solution numérique souffre toutefois de la « **malédiction de la dimensionnalité** », un défi bien connu en mécanique quantique. Pour le surmonter, nous reformulons le problème de Fokker-Planck comme une **équation de Schrödinger indépendante du temps**², permettant ainsi d'exploiter des méthodes **inspirées de la mécanique quantique**. Récemment, nous avons proposé une approche basée sur le solveur variationnel quantique (**VQE pour « Variational Quantum Eigensolver »**)², particulièrement adaptée à l'ère actuelle des ordinateurs quantiques (**NISQ pour « Noisy Intermediate-Scale Quantum »**)³. L'objectif de ce projet est de réaliser des **calculs de référence** qui serviront pour tester cette stratégie émergente en calcul quantique.

Le ou la stagiaire rejoindra un projet de recherche actif à l'interface entre **apprentissage automatique et mécanique quantique**. Le travail consistera à **implémenter des méthodes numériques pour des modèles à faible dimension**, puis utiliser **des algorithmes inspirés du quantique** pour les problèmes de dimension plus élevée⁴. Une poursuite en thèse sera possible.

Pré-requis : Connaissances de base pour la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles. Compétences en programmation. Capacité à lire et comprendre des articles scientifiques en anglais. Solides compétences en mathématiques.

Méthodes : Différentiation numérique. Algèbre linéaire. Problèmes numériques de valeurs propres.

Dates estimées : 02/2026 – 07/2026

Contact :

Loïc Joubert-Doriol, Maître de Conférences (Associate professor)
Laboratoire Modélisation et Simulation Multi-Echelle (MSME), Université Gustave Eiffel
Courriel : loic.joubert-doriol@univ-eiffel.fr

Références :

1 Soize & Ghanem: *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **432**, 117453 (2024). 2 Soize, Joubert-Doriol, & Izmaylov: *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **443**, 118080 (2025). 3 Tilly *et al.*: *Phys. Rep.* **986**, 1 (2022). 4 Gatti *et al.*: *Applications of quantum dynamics in chemistry*. Vol. 98. Heidelberg: Springer, 2017.