

1. CONTEXT

Un ordinateur quantique permet en théorie de résoudre des problèmes insolubles en temps limité par des ordinateurs classiques. Le développement d'algorithmes pour une machine quantique nécessite une mise forme adaptée du problème et une programmation spécifique aux propriétés des calculateurs quantiques. Mais récemment ont émergés des simulateurs et des bibliothèques de fonctions qui rendent possibles assez simplement le développement d'algorithmes quantiques (ref 1, 2).

2. GOAL

L'objectif est de développer un algorithme « preuve de concept » qui calcule l'alignement non séquentiel de deux structures de protéines. Contrairement au problème de l'alignement des séquences, qui a une solution en temps polynomial, le problème de l'alignement structural est NP-complexe et ne peut pas être résolu exactement en temps raisonnable avec une machine classique.

3. APPROACH

De nombreux exemples de programmes et de démonstrations de résolution de problèmes d'optimisation combinatoire sont disponibles sur les plateformes PennyLane et IBM. Ces programmes utilisent entre autre la bibliothèque Qiskit en python, par exemple (3) et (4). L'objectif n'est pas de développer un programme plus performant mais d'adapter les exemples donnés en démonstration à l'alignement non séquentiel de protéines pour un ou quelques exemples simples et d'analyser et critiquer les résultats obtenus.

4. REFERENCES

- (1) PennyLane : <https://pennylane.ai/>
- (2) IBM Quantum Plat : <https://quantum.ibm.com/>
- (3) Knapsack Problem https://pennylane.ai/qml/demos/tutorial_QUBO/
- (4) MaxCut problem : https://pennylane.ai/qml/demos/tutorial_qaoa_maxcut