



ROBERT RANQUET (72)

RENCONTRE AVEC ÉRIC CANCÈS (89), PRIX DARGELOS 2017



© ÉCOLE POLYTECHNIQUE - J. BARANDE

Bruno Angles (84), président de l'AX, a remis le prix Dargelos à Éric Cancès (89) lors du colloque du 30 novembre 2017.

JE TRAVAILLE DANS LE DOMAINE des mathématiques appliquées. Cette vaste discipline, largement enseignée à l'École polytechnique et à l'École des ponts, s'intéresse à des champs très divers comme l'aéronautique, la finance, la logistique, ou l'apprentissage automatique (*machine learning*).

Pour ma part, je me suis spécialisé en simulation moléculaire. C'est un sujet clé pour la compréhension des propriétés de la matière, avec des applications à différents domaines, comme la conception de nouveaux matériaux fonctionnels nanostructurés, la mise au point de nouveaux médicaments, la fabrication de nano-

objets, etc. C'est un domaine tellement important qu'il occupe environ 40 % du temps de calcul des supercalculateurs. Notre travail consiste à élaborer des modèles, puis des algorithmes qui seront transcrits en codes informatiques.

La difficulté principale qui rend extrêmement difficile la simulation numérique de cette équation est qu'il s'agit d'une équation aux dérivées partielles (EDP) en très grande dimension. Les EDP simulées, par exemple, dans l'industrie aéronautique pour concevoir de nouveaux avions font intervenir le temps et les trois coordonnées spatiales. Il en est de même pour la plupart des EDP rencontrées dans les applications (automobile, génie civil, exploration pétrolière, modèles de climat, etc.). Ces EDP sont simulées numériquement sur des maillages comportant de l'ordre de 10 à 1000 points de discrétisation par

Éric Cancès, lauréat « Dargelos » 2017, est né à Agen le 4 juin 1969. Entré à l'X en 1989, il poursuit ensuite ses études supérieures à l'École des ponts et à l'université Pierre-et-Marie-Curie. Il obtient un doctorat en mathématiques appliquées à l'École des ponts en 1998, avec une thèse intitulée : *Simulation moléculaire et effets d'environnement : approche mathématique et numérique*, puis une habilitation à diriger des recherches à l'université Paris-Dauphine. Auteur de nombreuses publications, il a été pendant treize ans professeur chargé de cours de mathématiques appliquées à l'École polytechnique. Il est actuellement professeur de mathématiques à l'École des ponts, tout en dirigeant le CERMICS, laboratoire de mathématiques appliquées de l'École des ponts, et membre de l'équipe-projet commune Inria-ENPC MATERIALS. Son domaine de recherche privilégié est l'analyse mathématique et la simulation numérique des modèles de structures électroniques pour la chimie quantique, la physique du solide et la science des matériaux.

SIMULER SCHRÖDINGER

Nos modèles sont basés sur la physique quantique, plus précisément sur l'équation de Schrödinger pour les systèmes moléculaires proposée par Dirac dès 1929. Un système moléculaire est y décrit comme un assemblage de noyaux atomiques et d'électrons en interaction. Cette équation a ceci de remarquable qu'elle décrit toute la chimie et la quasi-totalité de la physique des basses énergies. Par ailleurs, elle ne contient aucun paramètre empirique propre au système considéré, ce qui fait qu'on peut l'utiliser en principe pour prédire toutes les propriétés physiques et chimiques de molécules ou de matériaux non encore synthétisés.

direction d'espace. À l'inverse, l'équation de Schrödinger que nous manipulons fait intervenir 3^N coordonnées spatiales, N étant le nombre de particules. Avec une méthode standard utilisant 10 points de discrétisation par coordonnée, il faudrait 10^{39} points de discrétisation pour simuler une seule molécule d'eau (H_2O , 3 noyaux atomiques et 10 électrons, soit $N = 13$), ce qui est complètement hors de portée des plus puissants ordinateurs. Cela complique singulièrement la tâche... Pour reprendre les termes de Richard Bellman, il y a une vraie « malédiction de la dimension » ! Il s'agit donc de développer des méthodes numériques

*« Il y a une vraie
“malédiction
de la dimension” ! »*

alternatives radicalement différentes des méthodes usuelles.

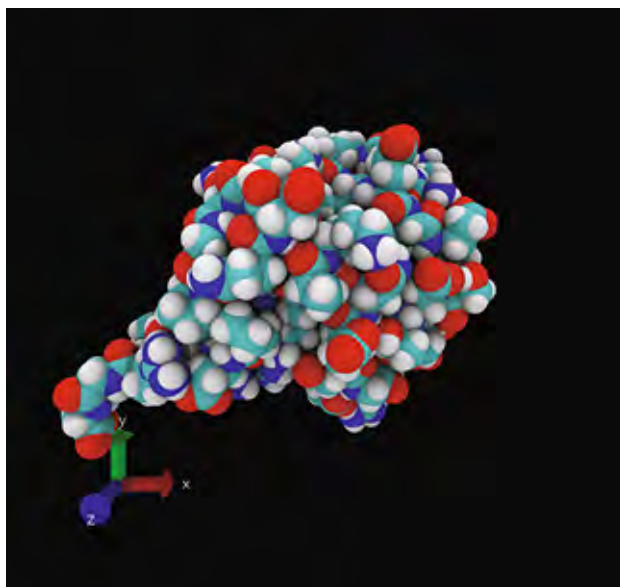
Une autre difficulté importante réside dans la multiplicité des échelles de temps à prendre en compte. Typiquement, l'échelle de temps pour décrire la vibration des atomes d'une liaison chimique est la femtoseconde (10^{-15} s). En revanche, le mécanisme de repliement des protéines, par exemple, se déroule quant à lui sur une échelle de l'ordre de la milliseconde. Il nous faut donc gérer cette différence considérable d'échelles (un facteur 10^{12}) dans nos modèles.

Les modèles de simulation moléculaire dérivés de l'équation de Schrödinger sont riches sur le plan mathématique, car ils font appel à des outils très divers, allant des outils traditionnels des mathématiques appliquées (équations aux dérivées partielles, processus stochastiques, optimisation...) à des objets relevant des mathématiques « pures », comme la géométrie non commutative ou la topologie algébrique. C'est cette dernière qui régit la physique des phases topologiques de la matière dont la découverte a été récompensée par le prix Nobel de physique 2016.

Nous appliquons ces modèles par exemple à l'étude de matériaux bidimensionnels hétérostructurés, c'est-à-dire d'empilements de quelques couches de matériaux ayant un seul atome d'épaisseur, comme le graphène. De tels matériaux ont souvent des propriétés topologiques intéressantes. C'est un travail que nous réalisons en coopération avec une équipe de physiciens de Harvard, avec en vue des applications à la technologie des capteurs, à la nanoélectronique ou à la santé. L'enjeu de la modélisation moléculaire, dans ce cas, est de prédire les propriétés fonctionnelles de ces matériaux, pour guider la recherche expérimentale : l'effort sera concentré sur la synthèse des quelques matériaux (parmi les millions de possibilités) possédant les meilleures propriétés. ■

LE PRIX DARGELOS

Pierre Dargelos (1909) a fait sa carrière dans les travaux publics, après avoir servi pendant la Première Guerre mondiale. Pour rendre hommage à la mémoire de son époux, Madame Dargelos a chargé en 1994 l'AX de fonder un prix scientifique portant son nom et l'a instituée par testament comme son légataire universel pour perpétuer ce prix. Le prix Dargelos, d'un montant de 40 000 €, récompense de jeunes chercheurs pour leurs travaux de haut niveau dans le domaine des sciences physiques, chimiques, biologiques, économiques, mathématiques, mécaniques, informatiques ou des sciences humaines et sociales. Pour pouvoir candidater au prix Dargelos, il faut : être âgé de moins de 50 ans au 31 décembre de l'année d'attribution ; être titulaire d'un diplôme de l'École polytechnique ou avoir effectué, pendant cinq ans au moins, des travaux de recherche au sein d'un laboratoire dont l'École polytechnique est tutelle. Les candidatures sont examinées par un jury de personnalités scientifiques, présidé cette année par Alain Aspect, membre de l'Académie des sciences, professeur à l'École polytechnique et à l'Institut d'optique Graduate School.



Simulation par dynamique moléculaire d'une protéine (l'ubiquitine) en solution.