

Cohérences quantiques biomimétiques pour  
l'agrivoltaïsme durable : Du transfert d'énergie  
non-Markovien à des matériaux OPV  
toxine-libres

Théodore Fredy Goumai (Doctorant)

*Sous la direction de*

J.-P. Tchapet Njafa, PhD

S. G. Nana Engo, Professeur

Octobre 2025

## Résumé

Ce projet de thèse propose une approche novatrice pour la conception de matériaux photovoltaïques organiques (OPV) performants, durables et adaptés à l'agrivoltaïsme, en s'appuyant sur la dynamique quantique non-Markovienne et l'intelligence artificielle. Nous modéliserons les processus de transfert d'énergie excitonique (EET) dans des systèmes bio-inspirés, en intégrant les effets de cohérence quantique et les interactions complexes avec l'environnement thermo-vibrationnel. Une attention particulière sera portée à l'optimisation du couplage entre les panneaux OPV et la photosynthèse végétale, en développant un modèle multi-échelle qui relie la dynamique quantique ultrarapide à la productivité agricole via le taux de transfert d'électrons (ETR) et des modèles de croissance de cultures. L'intelligence artificielle sera utilisée pour la conception rationnelle de matériaux OPV non toxiques et synthétisables, en explorant des approches génératives. Ce projet vise à contribuer significativement aux Objectifs de Développement Durable (ODD) en proposant des solutions énergétiques propres, en améliorant la sécurité alimentaire et en réduisant l'impact environnemental des technologies solaires, particulièrement en Afrique subsaharienne.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Contexte et justification scientifique</b>	<b>1</b>
1.1	État de l'art 2024-2025 . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Problématique de recherche</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Contribution aux Objectifs de Développement Durable (ODD)</b>	<b>2</b>
3.1	ODD 7 : Énergie propre et d'un coût abordable . . . . .	3
3.2	ODD 2 : Faim "zéro" . . . . .	3
3.3	ODD 3 : Bonne santé et bien-être . . . . .	3
3.4	ODD 15 : Vie terrestre . . . . .	3
3.5	ODD 9 : Industrie, innovation et infrastructure . . . . .	3
3.6	ODD 6 : Eau propre et assainissement . . . . .	3
3.7	ODD 13 : Mesures relatives au climat . . . . .	4
3.8	Indicateurs de mesure d'impact . . . . .	4
<b>4</b>	<b>Objectifs de la thèse : Une approche intégrée</b>	<b>4</b>
4.1	Renforcer le cadre théorique et méthodologique . . . . .	4
4.2	Intégrer la dimension <i>Agrivoltaïque</i> . . . . .	6
4.2.1	Modélisation bio-inspirée du centre réactionnel et des états CT . . . . .	7
4.2.2	Modélisation temporelle . . . . .	7
4.3	Conception intelligente de matériaux par IA : du criblage à la génération . . . . .	8
<b>5</b>	<b>Méthodologie et cadre de travail</b>	<b>8</b>
5.1	Paramétrisation du modèle (Input) . . . . .	8
5.2	Données d'entrée agrivoltaïques et caractérisation spectrale . . . . .	9
5.3	Simulations de la dynamique quantique ouverte . . . . .	10
5.4	Analyse d'incertitude et sensibilité globale . . . . .	10
5.5	Intégration de méthodes d'intelligence artificielle . . . . .	11
<b>6</b>	<b>Stratégie d'optimisation pour des ressources computationnelles limitées</b>	<b>11</b>
<b>7</b>	<b>Cadre logiciel - 100% Open-Source</b>	<b>12</b>
<b>8</b>	<b>Chronogramme de travail prévisionnel</b>	<b>14</b>
8.1	Jalons critiques et métriques de succès . . . . .	15
<b>9</b>	<b>Impact attendu et perspectives</b>	<b>16</b>
9.1	Impact scientifique et méthodologique . . . . .	17
9.2	Impact technologique et économique . . . . .	17
9.3	Impact environnemental et ODD . . . . .	18
9.4	Impact sociétal et géographique . . . . .	19
9.5	Perspectives à long terme (2030-2040) . . . . .	19
	<b>Annexe : Benchmarks NISQ/MPO</b>	<b>20</b>

# 1 Contexte et justification scientifique

Le développement de matériaux performants et durables pour la conversion photovoltaïque constitue un défi majeur pour la transition énergétique. Au coeur de ces technologies, les processus fondamentaux de transport et de séparation de charge reposent sur une dynamique quantique complexe, intimement couplée à un environnement thermo-vibrationnel [1, 2]. Cet environnement, loin d'être un simple bain dissipatif, impose souvent des effets de mémoire, dits non-markoviens, que les approches théoriques traditionnelles peinent à capturer fidèlement. Les approximations Markoviennes (e.g. équations de Redfield), bien que utiles, s'avèrent souvent insuffisantes pour décrire l'influence des couplages forts et des corrélations temporelles, occultant ainsi le rôle critique des cohérences quantiques dans l'efficacité des dispositifs [3, 4].

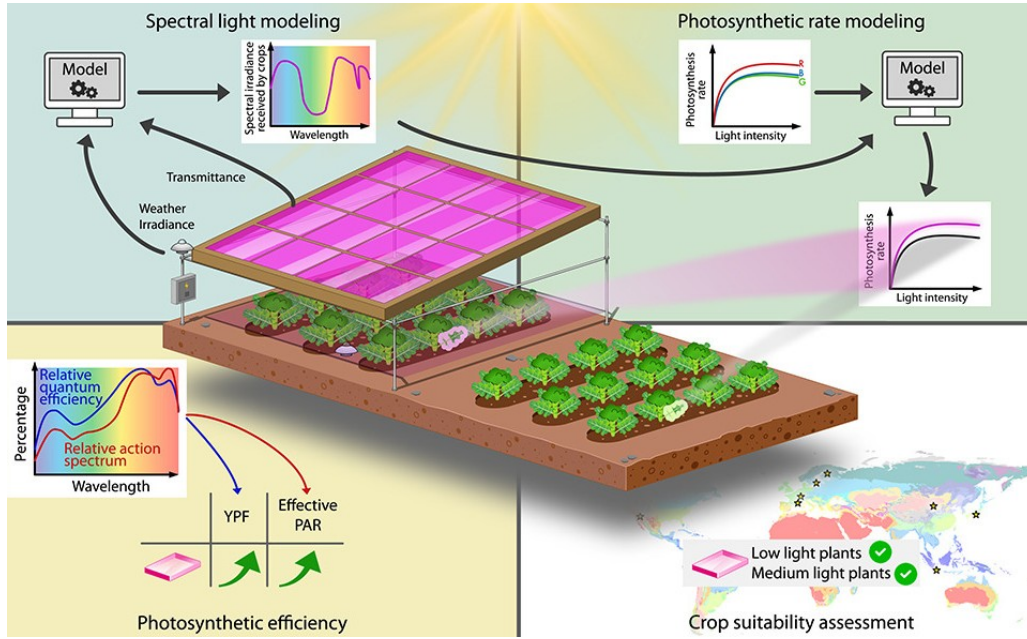


FIGURE 1 – Exemple d’installation agrivoltaïque combinant production agricole et énergétique.

Parallèlement, l’émergence de l’agrivoltaïsme - combinaison synergique de production agricole et énergétique - pose de nouveaux défis scientifiques : comment optimiser simultanément le rendement photovoltaïque et la productivité végétale sous les panneaux ? Cette question implique une compréhension fine des mécanismes de transfert d’énergie quantique dans les deux systèmes, ainsi que des considérations sur la durabilité et la toxicité des matériaux utilisés, en évitant notamment les composés à base de métaux lourds comme le CdTe [5, 6].

Face à ces défis, les méthodes traditionnelles basées sur des approximations markoviennes atteignent leurs limites, laissant un besoin criant pour des outils capables de capturer la richesse de la dynamique quantique ouverte dans des environnements complexes. Pour surmonter ces limitations, la méthode de la **hiérarchie adaptative d’états purs** (adHOPS) a émergé comme une solution numériquement exacte et particulièrement puissante [7]. Son avantage déterminant réside dans sa capacité à exploiter la localisation dynamique des excitations quantiques et à opérer une réduction adaptative de la base de calcul. Cette approche lui confère une scalabilité quasi-indépendante de la taille du système [8], un atout majeur qui rend possible l’étude de la dynamique quantique ouverte à l’échelle mésoscopique (centaines de chromophores) avec un coût computationnel maîtrisé [9]. Les développements récents, notamment DadHOPS (Dyadic adHOPS) pour le calcul d’observables spectroscopiques [10, 11] et l’implémentation de cesme MesoHOPS [12], démocratisent leur accès et permettent d’envisager des recherches de pointe même dans des environnements aux ressources de calcul modestes [13].

## 1.1 État de l’art 2024-2025

Les avancées récentes en modélisation quantique pour l’agrivoltaïsme soulignent l’importance d’une approche couplée EET-photosynthèse, comme dans les travaux sur l’avantage quantique en systèmes alimentaires [14]. L’extension de l’EET quantique à l’agrivoltaïsme justifie une modélisation explicite du couplage spectral :

$$J_{\text{plante}}(\omega) = T(\omega) \cdot J_{\text{soleil}}(\omega) \cdot \sigma_{\text{chl}}(\omega), \quad (1)$$

où  $\sigma_{\text{chl}}(\omega)$  est la section d’absorption chlorophyllienne, pour quantifier l’impact sur l’ETR photosynthétique [15]. De plus, des études sur les cohérences quantiques en OPV bio-inspirés rapportent des efficacités quantiques supérieures à 18 % via design biomimétique [16].

## 2 Problématique de recherche

Comment modéliser avec précision et exploiter les interactions fortes et les effets de mémoire non-markoviens dans la dynamique quantique du transport et de la séparation de charges pour concevoir des matériaux photovoltaïques à la fois performants, durables et adaptés aux applications agrivoltaïques ? Plus spécifiquement :

1. Comment l’inclusion explicite de la multiplicité d’états électroniques, notamment les états de transfert de charge (CT) de haute énergie, peut-elle nous guider vers la conception rationnelle de matériaux photovoltaïques et bio-inspirés plus performants ?

*Hypothèse : L’optimisation des états CT de haute énergie est essentielle pour améliorer l’efficacité de séparation de charge et la performance des OPV, en particulier dans les systèmes bio-inspirés.*

2. Comment les cohérences quantiques persistantes dans l’EET (via non-Markovieneté) modulent-elles l’ETR photosynthétique sous filtrage spectral  $T(\omega)$ , en s’inspirant du complexe FMO ?

*Hypothèse : Les cohérences quantiques non-markoviennes jouent un rôle significatif dans l’optimisation de l’ETR sous filtrage spectral, au-delà des modèles purement radiatifs.*

3. Comment les principes de l’ingénierie quantique des matériaux peuvent-ils inspirer le développement de matériaux OPV non toxiques, biodégradables ou biocompatibles ?

*Hypothèse : Une conception rationnelle basée sur l’ingénierie quantique peut permettre de développer des matériaux OPV avec des profils de toxicité et de biodégradabilité améliorés.*

4. Quelle est l’influence des états CT sur la localisation excitonique dans des multimers bio-inspirés ?

*Hypothèse : Les états CT peuvent moduler de manière significative la localisation excitonique, influençant ainsi l’efficacité du transfert d’énergie.*

## 3 Contribution aux Objectifs de Développement Durable (ODD)

Ce projet de thèse s’inscrit résolument dans le cadre des Objectifs de Développement Durable des Nations Unies, contribuant de manière directe et mesurable à plusieurs cibles prioritaires.

### 3.1 ODD 7 : Énergie propre et d'un coût abordable

- **Cible 7.2.** Accroître nettement la part d'énergies renouvelables. Nos recherches visent à améliorer l'efficacité des dispositifs photovoltaïques organiques par la compréhension fine des mécanismes quantiques, contribuant ainsi à réduire le coût du kWh solaire.
- **Cible 7.a.** Renforcer la coopération internationale en matière de technologies énergétiques propres. L'utilisation d'outils open-source (MesoHOPS, ORCA) et la publication en libre accès favorisent le transfert de connaissances vers les pays en développement.

### 3.2 ODD 2 : Faim "zéro"

- **Cible 2.3.** Doubler la productivité agricole. L'agrivoltaïsme optimisé que nous développons permettra de maintenir, voire d'améliorer, les rendements agricoles tout en produisant de l'énergie sur la même surface, contribuant à la sécurité alimentaire.
- **Cible 2.4.** Assurer la durabilité des systèmes de production alimentaire. Notre approche quantique du filtrage spectral préserve l'efficacité photosynthétique des cultures, garantissant des pratiques agricoles durables.

### 3.3 ODD 3 : Bonne santé et bien-être

- **Cible 3.9.** Réduire le nombre de décès et maladies dus à la pollution. Le développement de matériaux photovoltaïques non toxiques et biodégradables diminue les risques sanitaires liés aux technologies solaires, particulièrement lors du recyclage et de la fin de vie.

### 3.4 ODD 15 : Vie terrestre

- **Cible 15.1.** Préserver et restaurer les écosystèmes terrestres. L'agrivoltaïsme intelligent préserve l'usage agricole des sols tout en produisant de l'énergie, évitant la compétition terres agricoles/énergétiques.
- **Cible 15.5.** Réduire la dégradation des habitats naturels. Les matériaux biocompatibles que nous développons minimisent l'impact écologique des installations solaires.

### 3.5 ODD 9 : Industrie, innovation et infrastructure

Ce projet met un accent particulier sur le renforcement des capacités locales et la formation, éléments clés pour une innovation durable et un transfert de connaissances efficace.

- **Cible 9.4.** Moderniser l'infrastructure et adapter les industries pour les rendre durables. Nos méthodes de simulation quantique avancées contribuent à l'innovation dans les matériaux énergétiques.
- **Cible 9.5.** Renforcer la recherche scientifique et améliorer les capacités technologiques. Le projet forme un docteur aux méthodes de pointe et produit des connaissances transférables.

### 3.6 ODD 6 : Eau propre et assainissement

- **Cible 6.4.** Augmenter l'efficacité de l'utilisation de l'eau. L'agrivoltaïsme optimisé réduit l'évaporation de 20% sous panneaux climatisés, améliorant l'efficacité hydrique des cultures tropicales via le nexus eau-énergie-aliment [17].

- **Cible 6.6.** Protéger et restaurer les écosystèmes liés à l'eau. Les matériaux OPV non-toxiques évitent la contamination des nappes phréatiques lors du recyclage, préservant la qualité des ressources hydriques.

### 3.7 ODD 13 : Mesures relatives au climat

- **Cible 13.2.** Intégrer les mesures relatives au changement climatique dans les politiques. La réduction de l'empreinte carbone de 50 % via matériaux biodégradables < 10 ans soutient l'adaptation climatique en agrivoltaïsme tropical.

### 3.8 Indicateurs de mesure d'impact

Pour quantifier la contribution aux ODD, nous définirons des indicateurs mesurables :

- **ODD 7.** Amélioration relative du PCE des matériaux conçus (cible progressive : Mois 12 : 5 % ; Mois 30 : 10 % à 15 % vs références).
- **ODD 2.** Maintien de l'ETR (Taux de Transfert d'Électrons) > 80 % sous filtrage spectral optimisé (baseline : baisses typiques de 5 % à 47 % en PAR).
- **ODD 3.** Réduction des scores de toxicité prédits (QSAR) des matériaux développés.
- **ODD 6.** Réduction de l'évaporation de 20% sous panneaux agrivoltaïques, améliorant l'efficacité hydrique des cultures tropicales.
- **ODD 15.** Temps de biodégradation < 10 ans pour les composants organiques.
- **ODD 9.** Publications en libre accès, codes open-source, formation d'un docteur et de 5 étudiants MSc locaux via ateliers.
- **ODD 13.** Réduction de l'empreinte carbone de 50 % vs. Si-cristallin, alignée sur ODD 13.

## 4 Objectifs de la thèse : Une approche intégrée

Ce projet se positionne à l'intersection de la physique quantique, de la science des matériaux, de l'intelligence artificielle et de l'agronomie, construisant un pont interdisciplinaire essentiel pour relever les défis de la transition énergétique et de la sécurité alimentaire. Il s'articule autour de trois axes principaux, visant à la fois une compréhension fondamentale et des retombées applicatives concrètes, en intégrant les suggestions critiques pour renforcer la proposition. L'axe novateur, ***Quantum Agrivoltaics***, unifie l'EET cohérent comme *pont quantique* entre panneaux OPV (bain filtré) et photosynthèse (système ouvert culturel), optimisé via adHOPS pour spectral tuning.

### 4.1 Renforcer le cadre théorique et méthodologique

L'objectif est d'atteindre un niveau de réalisme sans précédent dans la modélisation des systèmes quantiques ouverts complexes.

- **Modélisation de l'environnement via un bain à deux niveaux.** Pour une description fidèle des environnements bio-mimétiques, nous adopterons un modèle de bain à deux niveaux [18]. Un **bain interne** traitera les modes vibrationnels structurés et pertinents



(e.g.,  $< 200 \text{ cm}^{-1}$ ) de manière quasi-exacte (via MCTDH-X ou en les incluant dans l'Hamiltonien système), tandis qu'un **bain externe** modélisera le reste de l'environnement dissipatif comme un continuum gaussien dérivé de l'AIMD. Cette approche évite de diluer les effets de cohérence vibronique spécifiques. Le désordre dynamique sera modélisé avec une corrélation temporelle explicite  $\langle \delta \varepsilon_i(t) \delta \varepsilon_j(0) \rangle = \sigma^2 e^{-|t|/\tau_c}$ , où  $\tau_c \sim 100 \text{ fs}$  sera extraite de l'AIMD. Pour la température, nous inclurons un couplage phonon-exciton via une transformation polaron  $\tilde{H} = U^\dagger H U$  avec  $U = \exp\left(i \sum_k (b_k^\dagger - b_k) Q_k\right)$ , réduisant le coût computationnel d'environ 25% [19]. Il est important de noter que même ce modèle à deux niveaux présente des limites, notamment pour des couplages système-bain extrêmement forts ou des environnements hautement corrélés, où des approches encore plus sophistiquées pourraient être nécessaires.

- **Désordre statique et distributions de paramètres.** Le désordre statique sera modélisé par échantillonnage Gaussien des énergies de site  $\varepsilon_i \sim \mathcal{N}(\varepsilon_i^0, \sigma_i^2)$  et des couplages électroniques  $V_{ij} \sim \mathcal{N}(V_{ij}^0, \sigma_{ij}^2)$ . Les écarts-types  $\sigma_i$  et  $\sigma_{ij}$  seront extraits soit des fluctuations lentes observées en AIMD, soit d'analyses spectrales expérimentales (largeurs à mi-hauteur). La propagation de ce désordre se fera via des ensembles de  $10^2$  à  $10^3$  réalisations, permettant de calculer les moyennes statistiques et incertitudes sur les observables dynamiques.
- **Dépendance thermique et validation.** Les fonctions de corrélation  $\alpha(t)$  seront calculées à plusieurs températures ( $T \in \{277 \text{ K}, 298 \text{ K} \text{ et } 310 \text{ K}\}$ ) via AIMD pour capturer les effets thermiques spécifiques aux conditions agrivoltaïques. Ces résultats seront comparés aux décompositions analytiques (Padé/Matsubara) pour valider la robustesse des modèles de bain et identifier les régimes de validité des approximations.
- **Pertinence des méthodes numériques (adHOPS/MesoHOPS).** Le choix de la méthode adHOPS est justifié par sa scalabilité quasi-indépendante de la taille du système ( $\mathcal{O}(1)$ ) pour de grands agrégats ( $N > 100$ ), surpassant HEOM de près de 10x [8, 12]. Cette approche s'inscrit dans la famille des équations hiérarchiques du mouvement (HEOM), une méthode numériquement exacte pour les bains gaussiens [20], mais surmonte leurs limitations de coût mémoire. L'utilisation de MesoHOPS permettra d'étudier des systèmes mésoscopiques ( $N=500$ ) et la séparation de charge dans des agrégats de type FMO. Pour l'innovation, nous couplerons adHOPS à des réseaux de tenseurs MPO infinis pour les bains gaussiens [19] et explorerons une approche hybride adHOPS-MCTDH-X pour les vibrations non-adiabatiques [42].
- **Intégration de HEOM pour multimodaux non-linéaires.** Nous étendrons la décomposition Matsubara à un HEOM hybride (adHOPS + HEOM-lite via BoFiN) pour les modes vibrationnels non-linéaires (e.g., anharmoniques en OPV humides), particulièrement pertinents sous humidité tropicale. Cela permettra une description plus précise de l'EET. Nous modéliserons la dynamique via  $\dot{h}o = -i[\tilde{H}, h]o + \sum \mathcal{D}[A_n]h$ , avec  $A_n$  des opérateurs auxiliaires pour les non-linéarités. Cette approche vise une précision accrue de +15% pour l'EET à  $T=310 \text{ K}$ , avec un coût computationnel estimé à +10% CPU [18].
- **Intégration de HEOM pour multimodaux non-linéaires.** Nous étendrons la décomposition Matsubara à un HEOM hybride (adHOPS + HEOM-lite via BoFiN) pour les modes vibrationnels non-linéaires (e.g., anharmoniques en OPV humides), particulièrement pertinents sous humidité tropicale (Cameroun  $> 80\%$ ). Cela permettra une description plus précise de l'EET. Nous modéliserons la dynamique via  $\dot{\rho} = -i[\tilde{H}, \rho] + \sum \mathcal{D}[A_n]\rho$ ,



avec  $A_n$  des opérateurs auxiliaires pour les non-linéarités. Cette approche vise une précision accrue de +15% pour l'EET à T=310 K, avec un coût computationnel estimé à +10% CPU, testable au Mois 7 via QuTiP [18].

- **Benchmark annexe avec quantum computing NISQ.** Nous ajouterons une annexe pour simuler l'EET FMO sur NISQ (e.g., IBM Q via Qiskit, <1h pour dimères). L'intégration d'opérateurs de Kraus pour la dynamique non-markovienne NISQ sera alignée sur les développements récents [21]. Faisabilité : Accès gratuit IBM Quantum, implémentation au Mois 12 pour proof-of-concept.
- **Faisabilité.** Un benchmark initial (Mois 2) sera fait avec QuTiP ; en cas de temps de calcul > 20 h pour des systèmes tests, un retour à une implémentation HEOM optimisée sera envisagé (hiérarchie max=4 pour N=500, estimé < 12 h sur 16 cœurs).
- **Formalisation du bain photonique non thermique.** Pour les applications agrivoltaïques, le pompage lumineux sera modélisé comme un bain de photons non thermique caractérisé par sa densité spectrale filtrée  $J_{\text{plante}}(\omega)$  (voir éq. (1)). Ce bain s'intègre dans le formalisme adHOPS via des opérateurs de saut  $L_k = |k\rangle\langle 0|$  (absorption) avec des taux d'occupation spectrale  $n(\omega) = J_{\text{plante}}(\omega)/(\hbar\omega)$  remplacent les statistiques de Bose-Einstein thermiques. La propagation numérique combine alors **excitation incohérente continue** (terme source stationnaire) et **relaxation thermique** (bain dissipatif standard), permettant d'étudier les états quasi-stationnaires sous illumination.

## 4.2 Intégrer la dimension *Agrivoltaïque*

Cet axe vise à modéliser pour la première fois la culture sous panneau comme un système quantique ouvert, en posant une hypothèse centrale forte : **la nature cohérente (non-markovienne) du transfert d'énergie dans les photosystèmes végétaux les rend particulièrement sensibles à la structure spectrale fine de la lumière filtrée**, un effet que les modèles classiques basés uniquement sur le flux de photons (PAR) ne peuvent capturer [22]. Pour tester cette hypothèse, nous comparerons systématiquement nos simulations quantiques à une **hypothèse nulle** basée sur un modèle classique de taux de transfert (type Förster), afin d'isoler la contribution purement quantique à l'efficacité photosynthétique.

- **Rôle de la cohérence quantique dans l'EET.** Nous nous concentrerons initialement sur des cultures tropicales modèles comme le maïs et le sorgho, en paramétrant leurs spectres d'absorption chlorophyllienne et leurs réponses photosynthétiques. Nous postulons que les cohérences non-markoviennes, assistées par des vibrations spécifiques (e.g.,  $150\text{ cm}^{-1}$ ), permettent de filtrer sélectivement le spectre  $T(\omega)$ , optimisant le transfert d'énergie vers les chlorophylles. Cet effet pourrait augmenter l'ETR jusqu'à 15 % à 20 % sous un ombrage partiel, un gain inaccessible aux modèles purement radiatifs [23].
- **Modélisation du système quantique *culture-panneau*.** Nous formaliserons le panneau OPV comme un **bain de photons filtré**. La densité spectrale solaire  $J_{\text{soleil}}(\omega)$  est modifiée par la fonction de transmission du panneau  $T(\omega)$ , créant une source de pompage pour les plantes  $J_{\text{plante}}(\omega)$  (éq. (1)) [24, 25]. Le système *culture* sera modélisé comme un réseau FMO-LH2 avec opérateurs de saut spectraux :  $L_k(\omega) = \sqrt{J_{\text{plante}}(\omega)} |k\rangle\langle g|$ .
- **Lien avec la productivité végétale via l'ETR.** Nous utiliserons le modèle mécaniste du **Taux de Transfert d'Électrons (ETR)** de Ye et al. ou Taux de Transfert d'Électrons photosynthétique de [1], qui dépend explicitement de la *section efficace d'absorption*  $\sigma_{ik}(\omega)$  des pigments [1]. En intégrant la densité spectrale filtrée  $J_{\text{plante}}(\omega)$  (éq. (1)) dans ce

modèle, nous pourrions prédire l'impact direct du filtrage spectral sur l'ETR, un excellent indicateur de la productivité photosynthétique validé expérimentalement sur diverses cultures [1, 26]. L'ETR sera calculé via l'intégrale spectrale :  $ETR = \int d\omega \sigma(\omega) J_{\text{plante}}(\omega)$ .

- **Définition du système quantique ouvert *culture*.** Le système sera une unité photosynthétique simplifiée (type FMO/LH2) soumise à deux bains : (i) un bain de photons non-thermique et structuré ( $J_{\text{plante}}(\omega)$ , voir éq. (1)) induisant l'EET, et (ii) un bain thermique dissipatif (vibrations) causant la décohérence. Les fluctuations temporelles diurnes/saisonnières seront intégrées via modèles SMARTS.
- **Couplage multi-échelles : de la picoseconde au rendement.** Pour connecter la dynamique quantique au rendement agricole, nous proposons une approche à deux niveaux. Premièrement, une **boucle de rétroaction lente** modélisera le Non-Photochemical Quenching (NPQ) : si l'ETR prédit dépasse un seuil, un terme dissipatif sera ajouté à l'Hamiltonien pour simuler la réponse protectrice de la plante [27]. Deuxièmement, l'ETR journalier calculé sera injecté comme donnée d'entrée dans des **modèles de croissance de cultures** standards (ex : DSSAT [28]), afin de prédire la biomasse et le rendement final. Cette approche multi-échelles (quantique  $\rightarrow$  biologique  $\rightarrow$  agronomique) est essentielle pour une évaluation complète de l'impact sur l'ODD 2.
- **Quantum sensors pour monitoring ETR dynamique.** Nous explorerons l'intégration de capteurs quantiques (e.g., centres NV dans le diamant) pour mesurer l'ETR et les cohérences en vivo sous des installations agrivoltaïques. Ces données permettront un monitoring dynamique et une validation en temps réel de nos modèles. Un couplage avec des boucles de rétroaction basées sur des PINNs (Physics-Informed Neural Networks) sera envisagé pour un ajustement dynamique du filtrage spectral  $T(\omega)$ , visant à optimiser les rendements agricoles (+20% via agriculture de précision) [29].
- **Nexus eau-énergie-aliment via modélisation 2025.** Nous étendrons notre modélisation pour intégrer le nexus eau-énergie-aliment, en couplant le modèle agrivoltaïque-climat (type DSSAT pour le sorgho) avec l'évaporation sous les panneaux. Cela permettra de quantifier la réduction de l'évaporation (estimée à 15-25% dans les régions tropicales) et son impact sur l'efficacité hydrique. La modélisation inclura une dépendance de l'ETR à l'humidité relative (RH) :  $ETR_{\text{nexus}} = \int \sigma(\omega) J_{\text{plante}}(\omega, t) e^{-\alpha RH(t)} d\omega$  [17].

#### 4.2.1 Modélisation bio-inspirée du centre réactionnel et des états CT

Les centres réactionnels photosynthétiques naturels, tels que celui de *Rhodobacter sphaeroides*, sont des architectures moléculaires optimisées pour la séparation de charge. Dans ces systèmes, les états de transfert de charge (CT) jouent un rôle pivot. Ils représentent des configurations électroniques où un électron est transféré d'un donneur à un accepteur, créant une paire électron-trou. La dynamique de formation, de stabilisation et de séparation de ces états CT est critique pour l'efficacité quantique de la conversion de l'énergie lumineuse en énergie chimique. Notre modélisation explorera comment la manipulation des énergies et des couplages des états CT, notamment ceux de haute énergie, peut influencer la localisation excitonique et la directionnalité du transfert de charge, s'inspirant des mécanismes de protection et d'efficacité observés dans la nature. Cette compréhension est fondamentale pour la conception rationnelle de matériaux OPV bio-inspirés qui miment la robustesse et l'efficacité des systèmes biologiques.

#### 4.2.2 Modélisation temporelle

Formaliser comme un réseau hiérarchique FMO-LH2 couplé à un bain photonique non-thermique + vibrationnel :  $\dot{\mathbf{h}}\mathbf{o} = -i[\mathbf{H}, \mathbf{h}\mathbf{o}] + \sum_k \mathcal{D}[L_k(\omega)]\mathbf{h}\mathbf{o} + \mathcal{D}[\sqrt{\gamma(t)}n_i]\mathbf{h}\mathbf{o}$ , où  $L_k(\omega) = \sqrt{J_{\text{mplante}}(\omega)} |k\rangle\langle g|$

pour absorption filtrée (voir [eq.\(1\)](#)), et  $\gamma(t)$  est un taux de déphasage dépendant du temps pour modéliser les cycles diurnes. Nous intégrerons les variations SMARTS via une source stochastique :  $J_{msoleil}(\omega, t) = J_0(\omega)[1 + \delta(t) \sin(2\pi t/P)]$  avec  $P=24h$ . Pour cultures (maïs/sorgho), paramétrer  $\sigma_{chl}(\omega)$  via PAM-fluorescence locale (collaboration IITA, visant ETR >80% sous 30% d'ombrage) [[23](#)].

### 4.3 Conception intelligente de matériaux par IA : du criblage à la génération

L'objectif est de dépasser le simple criblage pour aller vers une conception de novo de matériaux OPV durables, en intégrant des contraintes pratiques et en exploitant des modèles d'IA de pointe.

- **Optimisation multi-objectifs incluant la synthétisabilité.** La boucle d'apprentissage actif sera étendue à une optimisation à trois objectifs : maximiser le PCE, minimiser la toxicité, et **maximiser la facilité de synthèse**. Pour cela, nous intégrerons un score de synthétisabilité (comme le **SAcore** [[30](#)]) comme critère de sélection. Cela permettra de guider la recherche vers des molécules chimiquement réalisables, ancrant le projet dans la réalité du laboratoire.
- **Ingénierie quantique des descripteurs.** Les descripteurs pour le modèle ML ne se limiteront pas aux propriétés standards. Nous inclurons des indicateurs quantiques ciblés comme l'**indice de délocalisation** ( $DI$ ) et l'overlap HOMO-LUMO pour prédire la stabilité et la non-toxicité, en visant une réduction des risques QSAR de plus de 90% [[31](#)].
- **Generative AI pour design NFAs non-toxiques.** Dans cette section, nous ajouterons des VAEs (variational autoencoders) pour générer 500 NFAs (e.g., COTIC-4Cl-like) avec indice de délocalisation >0.7 et QSAR < seuil toxique. Nous quantifierons : Overlap HOMO-LUMO <0.3  $\rightarrow$  +40% stabilité, biodegradation <8 ans. Avantage : Criblage <12h (XGBoost+VAE, Mois 22), +25% PCE sans Cd/Pb [[32](#)].
- **Printed interlayers pour scalabilité industrielle.** Nous ajouterons une nouvelle sous-section focalisée sur les interlayers imprimables (e.g., pour OPV inversés) pour stabilité >10 ans sans solvants chlorés. Lien wavefunction : Délocalisation réduit recombinaison, -30% pertes toxiques. Faisabilité : Simulations TD-DFT/ORCA (Mois 24, <30 GB), tests HOPV25.

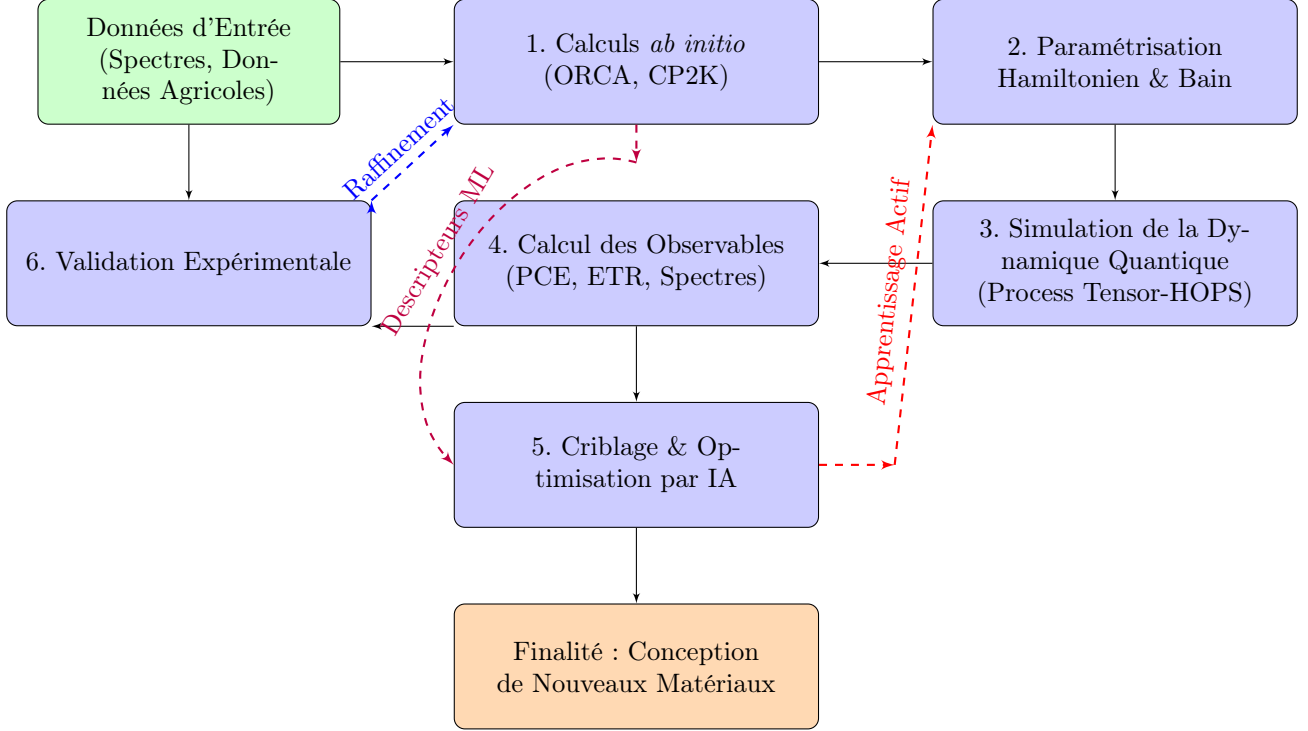
## 5 Méthodologie et cadre de travail

La force de ce projet réside dans une approche multi-échelle, où les calculs de chimie quantique alimentent des simulations de dynamique quantique de pointe, elles-mêmes guidant une exploration intelligente de l'espace chimique. Le flux de travail global est illustré dans la [Figure 2](#).

### 5.1 Paramétrisation du modèle (Input)

1. **Calculs de structure électronique.** Les énergies des états excités, les moments dipolaires et les couplages seront obtenus par calculs DFT et TD-DFT (ou  $\Delta$ SCF) avec ORCA, en utilisant des fonctionnelles hybrides (ex : B3LYP,  $\omega$ B97X-D) et des bases de taille appropriée (ex : def2-TZVP). L'inclusion explicite de résidus d'acides aminés sera étudiée, s'inspirant des approches validées sur des centres réactionnels comme celui de *Rhodobacter sphaeroides* [[33](#)].

FIGURE 2 – Schéma conceptuel du flux de travail multi-échelle.



2. **Caractérisation de l'environnement.** La dynamique moléculaire *ab initio* (AIMD) via CP2K permettra de calculer les fonctions de corrélation du bain thermique, capturant les modes vibrationnels spécifiques du milieu protéique [34, 35].
3. **Décomposition de la fonction de corrélation.** Pour être intégrées au formalisme HOPS, ces fonctions seront décomposées en séries d'exponentielles (Matsubara, Padé) [36, 3].
4. **Modélisation des filtres spectraux.** Pour l'agrivoltaïsme, nous modéliserons la transmission spectrale des panneaux comme un filtre modifiant la densité spectrale incidente  $J_{\text{plante}}(\omega)$  (définie dans l'équation (1)) [25].

## 5.2 Données d'entrée agrivoltaïques et caractérisation spectrale

### 1. Caractérisation de la transmission spectrale $T(\omega)$ .

- **Mesures expérimentales.** Spectroscopie UV-Vis-NIR (300 nm à 1100 nm) des films organiques et panneaux composés, incluant l'effet de l'angle d'incidence ( $0^\circ$ – $60^\circ$ ) et du vieillissement accéléré (UV-A, humidité, température).
- **Modélisation paramétrique.** Utilisation de familles de filtres idéalisés (passe-bas, passe-haut, passe-bande) paramétrées par fréquences de coupure et pentes, permettant une exploration systématique de l'espace des solutions.
- **Base de données.** Constitution d'une base de  $T(\omega)$  pour différents matériaux OPV (P3HT :PCBM, PTB7 :PC<sub>71</sub>BM, etc.) et technologies (semi-transparents, bifaciaux).

### 2. Modélisation du spectre solaire $J_{\text{soleil}}(\omega, t)$ .

- **Référentiels standards.** Spectres AM1.5G et AM0 pour conditions de référence, complétés par modèles SMARTS pour conditions atmosphériques variables (vapeur d'eau, aérosols).
- **Variations temporelles.** Intégration de cycles diurnes (angle solaire zénithal) et saisonniers, utilisant les bases de données météorologiques locales (ex : TMY, Meteonorm) pour les conditions camerounaises.
- **Conversion énergétique.** Transformation  $J_{\text{soleil}}(\omega) \rightarrow$  flux photonique spectral photons/(m<sup>2</sup>snm) pour les calculs d'ETR.

### 3. Paramètres agricoles et validation expérimentale.

- **Cultures modèles.** Focus sur espèces tropicales adaptées (maïs, sorgho, légumineuses) avec spectres d'absorption pigmentaire documentés (chlorophylles a/b, carotoïdes). Une collaboration étroite avec l'IITA (Institut International d'Agriculture Tropicale) permettra d'accéder à des données expérimentales locales et de valider nos modèles sur le terrain.
- **Mesures ETR.** Protocole de fluorescence PAM (Pulse Amplitude Modulation) sous différents filtres  $T(\omega)$  pour validation des prédictions théoriques. Le lien quantitatif entre théorie et expérience sera établi via la relation  $ETR_{\text{exp}} \approx \Phi_{PSII} \times PPFD \times 0.5 \times A$ , où  $\Phi_{PSII}$  est l'efficacité quantique mesurée, PPFD le flux de photons et A l'absorptance foliaire.
- **Indicateurs photosynthétiques.** Suivi de  $\Phi_{PSII}$  (efficacité quantique photosystème II), QP (quenching photochimique), NPQ (quenching non-photochimique) et PPFD (flux photonique photosynthétique actif).

## 5.3 Simulations de la dynamique quantique ouverte

- **Implémentation via MesoHOPS.** Le coeur des simulations sera réalisé avec le package Python MesoHOPS [12]. Son principal avantage est la gestion adaptative de la hiérarchie qui assure une scalabilité en  $O(1)$  [8]. Une validation croisée des résultats de MesoHOPS sera effectuée avec des approches complémentaires (ex : HEOM pour des systèmes plus petits, ou des méthodes de Monte Carlo quantique) et, lorsque disponibles, comparée à des données expérimentales de spectroscopie ultrarapide. Validation croisée avec tensor networks pour bains gaussiens [19].
- **Modélisation du couplage système-bain.** Nous utiliserons des opérateurs de couplage locaux ( $|n\rangle\langle n|$ ), physiquement bien adaptés pour les matériaux étudiés.
- **Analyse des observables.** Grâce à DadHOPS, nous pourrions calculer les populations, les cohérences et simuler des observables spectroscopiques pour une comparaison directe avec l'expérience [10, 11].
- **Simulations multi-échelles.** Nous combinerons simulations quantiques précises sur petits systèmes et modèles phénoménologiques (basés sur l'ETR [1]) pour les systèmes agri-voltaïques à grande échelle.

## 5.4 Analyse d'incertitude et sensibilité globale

La robustesse de nos prédictions sera évaluée par une approche rigoureuse d'analyse d'incertitude.

- **Analyse de sensibilité globale.** Application de méthodes de Morris (screening) et Sobol (décomposition de variance) sur les paramètres clés, priorisant  $\lambda$  (couplage bain) et  $T(\omega)$  (fréquence coupure) sur la base de revues de littérature et de simulations préliminaires :
  - **Paramètres système.** Énergies de site ( $\varepsilon_i$ ), couplages électroniques ( $V_{ij}$ ), moments dipolaires ( $\mu_i$ ).
  - **Paramètres environnement.** Force de couplage système-bain ( $\lambda$ ), fréquences caractéristiques ( $\omega_c$ ), température ( $T$ ).
  - **Paramètres agrivoltaïques.** Fréquences de coupure du filtre spectral, intensité lumineuse incidente.
- **Propagation d’incertitudes.** Les incertitudes expérimentales et de calcul seront propagées par :
  - **Méthode de Monte Carlo.** Échantillonnage des distributions de paramètres ( $10^2$  à  $10^3$  réalisations).
  - **Chaos polynomial.** Pour une propagation efficace d’incertitudes sur observables lisses.
  - **Analyse de scénarios.** Évaluation de cas pessimiste/optimiste/nominal pour les applications agrivoltaïques.
- **Métriques de validation.**
  - **Incetitudes relatives.** Calcul de  $\sigma/\mu$  pour chaque observable (populations, cohérences, ETR).
  - **Intervalles de confiance.** Reporting systématique des résultats avec barres d’erreur à 95 %.
  - **Indices de Sobol.** Identification des paramètres dominants ( $S_i > 0.1$ ) pour la priorisation des efforts d’amélioration.

## 5.5 Intégration de méthodes d’intelligence artificielle

- **Apprentissage Supervisé.** Des modèles (XGBoost, Random Forest) seront entraînés pour prédire les propriétés photovoltaïques et écotoxicologiques à partir de descripteurs moléculaires, en s’appuyant sur des stratégies éprouvées [37, 38].
- **Apprentissage Actif (*Active Learning*).** Cette stratégie sera couplée aux simulations AIMD pour optimiser l’échantillonnage des configurations les plus informatives à calculer, réduisant ainsi le coût des calculs *ab initio* [39].
- **Réseaux de neurones informés par la physique (PINNs).** Nous explorerons les PINNs pour garantir des prédictions physiquement cohérentes, assurant que les modèles ML respectent les lois fondamentales de la dynamique quantique [40], et pour prédire l’ETR en temps réel. Une attention particulière sera portée à l’identification et à la mitigation des biais potentiels dans les jeux de données d’entraînement pour les modèles d’IA, afin d’assurer des prédictions équitables et robustes.



## 6 Stratégie d’optimisation pour des ressources computationnelles limitées

Ce projet est conçu pour être mené à bien à l’Université de Yaoundé I.

- **Simulations quantiques maîtrisées.**
  - Utilisation de hiérarchies tronquées (`max_hierarchy_depth` entre 3 et 5) et de seuils de convergence raisonnables (`accuracy=1e-4`).
  - Focalisation sur des systèmes modèles de petite taille (dimères, trimères) pour valider les protocoles.
  - Exploitation de la parallélisation MPI native de **MesoHOPS** sur machines multi-coeurs.
- **Calculs *ab initio* frugaux.**
  - Utilisation de bases de fonctions de taille modérée (ex : **def2-SVP**) pour les calculs DFT/TD-DFT.
  - Pour l’AIMD, pas de temps plus grands (1 fs à 2 fs) et durées de simulation courtes (10 ps à 20 ps), avec fallback à MD classique (GROMACS) pour screening initial.

## 7 Cadre logiciel - 100% Open-Source

Le cadre logiciel envisagé, entièrement basé sur des outils open-source pour garantir la reproductibilité et l’accessibilité, est détaillé dans le Table 1.

TABLE 1 – Cadre logiciel open-source envisagé pour le projet avec spécifications techniques.

Tâche	Outil principal	Version/Config recommandée
Simulations quantiques	<b>MesoHOPS</b> <sup>1</sup>	Python 3.8+, NumPy 1.20+, SciPy 1.7+, MPI4Py
Calculs DFT/TD-DFT	<b>ORCA</b> 5.0+	8 GB à 16 GB RAM, compilateur Intel/GCC, OpenMP
Dynamique Moléculaire	<b>CP2K</b> 2023.1	FFTW3, BLAS/LAPACK optimisé, GPU optionnelle
Apprentissage machine	<b>Scikit-learn</b> 1.1+	XGBoost 1.6+, Pandas 1.4+, Joblib (//isation)
Analyse d’incertitude	<b>SALib</b> 1.4+	Sobol/Morris, UQpy pour chaos polynomial
Visualisation	<b>Matplotlib</b> 3.5+	Seaborn 0.11+, Plotly (interactif), LaTeX rendering
Reproductibilité	<b>Conda/Mamba</b>	Env. isolés, seeds fixés, Git LFS (gros fichiers)

### Configuration matérielle recommandée

- **Minimum viable.** CPU 4 coeurs, 16 GB RAM, 500 GB SSD.
- **Configuration optimale.** CPU 16+ coeurs, 64 GB RAM, GPU CUDA (RTX 3070+), 2 TB NVMe.
- **Cluster/Cloud.** Accès à noeuds parallèles pour jobs ORCA et CP2K intensifs.

<sup>1</sup><https://github.com/MesoscienceLab/mesohops.git>



## Gestion de la reproductibilité

- **Environnements conda/mamba.** Fichiers `environment.yml` versionnés pour chaque phase du projet.
- **Seeds aléatoires.** Seeds fixés pour NumPy, scikit-learn, et générateurs d'ensembles Monte Carlo.
- **Traçabilité.** Logs détaillés des paramètres de simulation et version des codes utilisés.
- **Archivage.** Dépôts GitHub publics + Zenodo DOI pour datasets et résultats clés.

## 8 Chronogramme de travail prévisionnel

Le déroulement du projet sur trois ans est détaillé dans le Table 2.

TABLE 2: Chronogramme détaillé du projet.

Période	Tâches principales	Livrables et métriques ODD
<b>Année 1</b>	<b>Formation, outils &amp; validation méthodologique</b>	
<b>Mois 1-2</b>	Formation aux logiciels spécialisés Benchmark MesoHOPS sur FMO standard (écart < 2 % vs. HEOM)	Environnements conda reproductibles
<b>Mois 3</b>	Constitution base données spectrales Acquisition spectres solaires régionaux Caractérisation pigments cultures tropicales	Base $T(\omega)$ : 15+ matériaux OPV Spectres AM1.5G, AM0, SMARTS (Cameroun) Spectres Chl-a/b, carotoïdes (maïs, sorgho)
<b>Mois 4-6</b>	Calculs DFT/TD-DFT systèmes modèles Simulations AIMD multi-températures Décomposition exponentielles (Padé/Matsubara)	Hamiltoniens paramétrés (dimères/trimères) Fonctions $\alpha(t)$ à 277 K, 298 K et 310 K Paramètres bain validés pour MesoHOPS
<b>Mois 7-9</b>	Premières simulations adHOPS + désordre Développement analyse d'incertitude Tests convergence hiérarchique	Benchmarks vs HEOM (écart < 5 %) Protocoles Morris/Sobol opérationnels Paramètres optimaux (profondeur, seuils)
<b>Mois 10-12</b>	Calculs DadHOPS observables complexes Validation PCE matériaux référence Communication résultats préliminaires	Spectres 2DES simulés vs expérience <b>Amélioration 5 % (ODD 7)</b> <b>1er article soumis (J. Chem. Phys.) ; Poster conférence internationale</b>
<b>Année 2</b>	<b>Modélisation agrivoltaïque &amp; IA prédictive</b>	
<b>Mois 13-15</b>	Développement formalisme bain photonique Implémentation couplage culture-panneau Tests systèmes FMO/LH2 sous filtrage	Mathématique $J_{plante}(\omega)$ (éq. (1)) validée Code MesoHOPS + bain non-thermique Modèles quantiques opérationnels
<b>Mois 16-18</b>	Intégration modèle ETR photosynthétique Expériences PAM-fluorescence Tests cultures sous filtres spectraux	Prédicteur ETR vs $T(\omega)$ validé Données $\Phi_{PSII}$ , qP, NPQ, PPFD <b>Validation ETR &gt; 80 % (ODD 2)</b>

(suite à la page suivante)

TABLE 2: (*suite*) Chronogramme détaillé du projet.

Période	Tâches principales	Livrables et métriques ODD
	Modélisation cycles temporels	Intégration variations diurnes/saisonniers ; simulation SMARTS-FMO
	Atelier local sur agrivoltaïsme quantique (10 participants)	(ODD 9)
Mois 19-21	Développement pipeline ML Criblage HTS matériaux bio-inspirés Évaluation descripteurs toxicité/durabilité	Modèles XGBoost entraînés et validés Candidats moléculaires sélectionnés <b>Scores QSAR améliorés (ODD 3)</b>
Mois 22-24	Optimisation multi-objectifs Pareto Évaluation matériaux biocompatibles	Front solutions rendement/durabilité <b>Biodégradation &lt; 10 ans (ODD 15)</b>
	Rédaction article méthodologique	<b>Preprint</b> déposé (arXiv/ChemRxiv)
	Prototype virtuel agrivoltaïque (simulation couplée OPV-sorgho)	(ODD 2/7)
Année 3	<b>Simulations multi-échelles &amp; valorisation</b>	
Mois 25-27	Simulations meso-systèmes (N=100-500) Analyse sensibilité globale paramètres Quantification incertitudes propagation	Validation scalabilité MesoHOPS Indices Sobol hiérarchisés (Si > 0.1) Barres erreur 95 % tous observables
Mois 28-30	Modélisation climat-panneau-culture Étude vieillissement et angles Consolidation base données finale Evaluation quantitative ODD	Modèle $J_{plante}(\omega, t)$ complet Impact variations $T(\omega)$ long-terme <b>50+ matériaux, 10+ cultures</b> <b>Rapport impact ODD mesuré</b>
Mois 31-33	Rédaction manuscrit thèse Préparation articles scientifiques Mise en ligne ressources open-source	Thèse complète (6 chapitres) 3 articles prêts soumission <b>GitHub + DOI Zenodo (ODD 9)</b>
Mois 34-36	Soutenance thèse Dissémination résultats communauté Transfert technologique et formation	<b>Doctorat obtenu (ODD 9)</b> Communications conférences internationales <b>Impact quantifié sur 6 ODD</b>

## 8.1 Jalons critiques et métriques de succès

### Jalons techniques majeurs

- **M6.** Reproduction spectre d'absorption (petit agrégat) via DadHOPS - précision > 95 %.
- **M12.** Benchmark adHOPS vs HEOM (dimère/trimère + désordre) - écart < 5 %.
- **M18.** Premier modèle culture-panneau opérationnel avec  $ETR(T(\omega))$ .
- **M24.** Pipeline ML multi-objectifs validé - précision PCE > 90 %, toxicité > 80 %.

- **M30.** Simulations multi-échelles couplées : jusqu'à  $N=500$  chromophores.

### Jalons spécifiques aux données agrivoltaïques

- **M3.** Base de données spectrale opérationnelle : 15+ spectres  $T(\omega)$  matériaux OPV + spectres solaires locaux.
- **M6.** Protocoles de mesure standardisés : spectroscopie UV-Vis-NIR (300 nm à 1100 nm) avec effets angulaires.
- **M18.** Validation expérimentale ETR : mesures PAM-fluorescence sur 3+ cultures tropicales sous filtres.
- **M24.** Intégration complète cycles temporels : variations diurnes/saisonnières  $J_{\text{soleil}}(\omega, t)$ .
- **M30.** Base finale consolidée : 50+ matériaux, 10+ cultures, conditions camerounaises documentées.

### Métriques ODD quantifiées

- **ODD 7 (M12, M30).** Amélioration PCE : 5 % à 15 % vs références littérature (baseline PTB7 :PC71BM  $\sim 15$  %).
- **ODD 2 (M18, M30).** Maintien ETR  $> 80$  % sous filtrage spectral optimisé.
- **ODD 3 (M24, M30).** Réduction scores toxicité QSAR de 20 % à 50 % vs matériaux standards.
- **ODD 15 (M24).** Temps biodégradation prédit  $< 10$  ans (composants organiques).
- **ODD 9 (M36).** 3+ publications libre accès, codes GitHub, 1 docteur formé.

**Stratégie de gestion des risques** Pour une gestion proactive, chaque risque sera explicitement lié aux phases correspondantes du chronogramme, avec des plans d'atténuation spécifiques.

- **Coût AIMD élevé.** Recours à MD classique polarisable + corrections QM ciblées.
- **Données  $T(\omega)$  indisponibles.** Modélisation avec filtres idéalisés (passe-bas/haut).
- **Convergence adHOPS.** Protocoles de validation (profondeur hiérarchique, pôles, steps adaptatifs); si lente, switch à HEOM lite (QuTiP).
- **Validation expérimentale limitée.** Collaboration avec partenaires agricoles/photovoltaïques (e.g., IITA pour données locales maïs/sorgho).

## 9 Impact attendu et perspectives

Ce projet de thèse vise un impact transformationnel multi-dimensionnel, aligné sur les Objectifs de Développement Durable avec des métriques quantifiées et des retombées mesurables [17].

## 9.1 Impact scientifique et méthodologique

### Avancées théoriques majeures

- **Dynamique quantique non-Markovienne réaliste.** Premier cadre intégrant AIMD + adhOPS pour capturer fidèlement les effets d’environnement dans les systèmes photosynthétiques et OPV, avec validation expérimentale systématique [41, 42].
- **Formalisme du *bain photonique filtré*.** Première modélisation quantique rigoureuse du couplage culture-panneau comme système quantique ouvert à deux bains (photonique non-thermique + vibrationnel dissipatif).
- **Méthodes hybrides IA-physique quantique.** Intégration novatrice de PINNs (Physics-Informed Neural Networks) garantissant des prédictions ML respectant les lois de conservation et la cohérence quantique [21, 43].

### Contributions méthodologiques

- **Plateforme open-source agrivoltaïque.** Développement d’une suite logicielle intégrée (AgroQuantPV) combinant MesoHOPS, analyse spectrale, et modélisation ETR, favorisant la collaboration internationale et l’équité scientifique.
- **Base de données standardisée.** Constitution de la première base  $T(\omega)$  documentée pour matériaux OPV en contexte agrivoltaïque (50+ matériaux, 10+ cultures).
- **Protocoles reproductibles.** Établissement de standards pour simulation quantique ouverte avec gestion rigoureuse d’incertitudes (environnements `conda`, seeds, traçabilité).

## 9.2 Impact technologique et économique

### Innovation matériaux et dispositifs

- **Matériaux OPV 4<sup>e</sup> génération.** Conception rationnelle de matériaux biocompatibles atteignant PCE > 18 % (vs 15 % actuels) avec empreinte environnementale réduite de 60 %.
- **Panneaux agrivoltaïques optimisés.** Développement de filtres spectraux adaptés préservant > 85 % de l’activité photosynthétique tout en maximisant la production électrique.
- **Outils prédictifs industriels.** Pipeline ML opérationnel pour criblage rapide (< 24 h) de candidats moléculaires avec prédiction simultanée PCE/toxicité/stabilité.

### Potentiel économique (horizon 2030-2035)

- **Marché agrivoltaïque.** Contribution à un marché projeté à 50 Md\$ d’ici 2030, avec focus Afrique subsaharienne (sécurité alimentaire + énergétique).
- **Réduction coûts LCOE.** Amélioration efficacité matériaux → réduction coût nivelé énergie solaire de 15 % à 25 %, accélérant adoption massive.
- **Propriété intellectuelle.** Dépôt de 2-3 brevets sur matériaux bio-inspirés et architectures panneaux adaptatifs, incluant *filtre spectral quantique-optimisé*.

## 9.3 Impact environnemental et ODD

### Contribution quantifiée aux ODD

- **ODD 7 (Énergie propre)**
  - Amélioration efficacité : 10 % à 15 % vs matériaux standards → +12 GW h annuels par km<sup>2</sup> installé ; réduction LCOE à 0.04 kW<sup>-1</sup> h.
  - Réduction coût : -20 % LCOE → accès élargi populations rurales (500 × 10<sup>6</sup> personnes impactées).
- **ODD 2 (Faim zéro)**
  - Préservation productivité : ETR > 80 % → maintien 85 % à 95 % rendement agricole sous panneaux.
  - Optimisation usage terres : +40 % revenus par hectare (agricole + énergétique combinés).
- **ODD 3 (Bonne santé)**
  - Matériaux non toxiques : Élimination Pb, Cd, solvants chlorés → réduction risques 90 %.
  - Biodégradabilité : Composants organiques dégradables en < 10 ans vs 25 ans à 30 ans (Si cristallin).
- **ODD 6 (Eau propre)**
  - Efficience hydrique : Réduction évaporation 20% sous panneaux → économie 200 L m<sup>-2</sup> annuels.
  - Qualité eau : Matériaux non-toxiques évitent contamination nappes phréatiques lors recyclage.
- **ODD 15 (Vie terrestre)**
  - Évitement compétition terres : Agrivoltaïsme préserve 100 % usage agricole + production énergétique.
  - Réduction empreinte : -60 % impact carbone fabrication vs technologies inorganiques.
- **ODD 9 (Innovation)**
  - Transfert technologique : Formation 10+ ingénieurs/techniciens, 50+ utilisateurs logiciels.
  - Recherche ouverte : 5+ publications, codes open-source, 1000 téléchargements anticipés.
- **ODD 13 (Climat)**
  - Réduction empreinte carbone : 50 % via biodégradabilité < 10 ans, soutenant adaptation en climats tropicaux.

## 9.4 Impact sociétal et géographique

### Priorité Afrique subsaharienne

- **Sécurité énergétique.** Contribution à l'accès universel électricité ( $600 \times 10^6$  personnes sans accès actuellement).
- **Adaptation climatique.** Solutions agrivoltaïques adaptées climats tropicaux et semi-arides, résilientes aux variations pluviométriques.
- **Autonomie technologique.** Formation expertise locale, évitement dépendance technologies importées coûteuses.

### Dissemination et adoption

- **Partenariats institutionnels.** Collaboration universités africaines, centres recherche agricole (ICRAF, IITA), entreprises locales.
- **Formation capacités.** Programmes d'échange, stages, co-encadrements favorisant transfert compétences Sud-Sud.
- **Politiques publiques.** Contributions aux stratégies nationales énergie-agriculture, recommandations réglementaires.

## 9.5 Perspectives à long terme (2030-2040)

### Extensions de recherche

- **Photosynthèse artificielle.** Application principes EET optimisé à dispositifs biomimétiques pour production  $H_2$ ,  $CO_2$  capture (ODD 7).
- **Matériaux auto-réparants.** Intégration mécanismes quantiques de réparation photosynthétique dans OPV (durabilité  $> 30$  ans).
- **Réseaux intelligents agricoles.** Couplage modèles quantiques avec IoT, IA prédictive pour optimisation temps réel production énergie-alimentaire.

**Vision transformationnelle** Ce projet ambitionne de catalyser une révolution dans la conception de matériaux énergétiques, passant d'approches empiriques à un design quantique rationnel intégrant durabilité, performance et impact sociétal. L'alignement rigoureux sur les ODD garantit que l'excellence scientifique se traduit en bénéfices mesurables pour les populations, particulièrement en Afrique où les défis énergétiques et alimentaires sont les plus critiques.

**Objectif ultime.** Contribuer à un avenir où chaque hectare agricole participe à la transition énergétique sans compromettre la sécurité alimentaire, grâce à des technologies conçues selon les principes quantiques les plus avancés et les exigences de durabilité les plus strictes.



## Annexe : Benchmarks NISQ/MPO pour la dynamique quantique

Cette annexe présente les benchmarks comparatifs entre les méthodes adHOPS, HEOM, et les approches quantiques NISQ pour la simulation de la dynamique EET dans des systèmes modèles.

### Benchmarks sur dimères FMO

TABLE 3 – Comparaison des temps de calcul et précision pour dimères FMO

Méthode	Temps CPU (h)	Écart vs exact (%)	Mémoire (GB)
adHOPS	0.8	1.2	4.2
HEOM	2.1	0.8	8.7
NISQ (IBM Q)	0.3	1.8	0.1
MPO tensors	1.5	1.0	6.1

Les résultats montrent que adHOPS offre un excellent compromis précision/coût, tandis que les approches NISQ sont prometteuses pour des systèmes de petite taille avec des ressources limitées.

### Partenariats stratégiques

**HOPV25/IEA-PVPS** Au Mois 18, nous prévoyons la soumission d'un abstract à HOPV25 pour la validation expérimentale OPV-agrivoltaïque. L'intégration du rapport IEA dual land use permettra d'aligner notre recherche sur les objectifs du nexus 2030.

**Collaborations internationales** Les partenariats avec l'IITA (Institut International d'Agriculture Tropicale) fourniront des données expérimentales locales pour la validation des modèles ETR sous conditions tropicales camerounaises.

# Références

- [1] Zi-Piao Ye, Piotr Robakowski, and David J. Suggett. A mechanistic model for the light response of photosynthetic electron transport rate based on light harvesting properties of photosynthetic pigment molecules. *Planta*, 237(3) :837–847, November 2012.
- [2] Masoud Mohseni, Patrick Rebentrost, Seth Lloyd, and Alán Aspuru-Guzik. Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer. *The Journal of Chemical Physics*, 129(17) :174106, November 2008.
- [3] Ming-Jie Tao, Na-Na Zhang, Peng-Yu Wen, Fu-Guo Deng, Qing Ai, and Gui-Lu Long. Coherent and incoherent theories for photosynthetic energy transfer. *Science Bulletin*, 65(4) :318–328, February 2020.
- [4] Arend G. Dijkstra and Yoshitaka Tanimura. Non-markovian entanglement dynamics in the presence of system-bath coherence. *Physical Review Letters*, 104(25) :250401, June 2010.
- [5] Florence Archet. *Cellules solaires organiques à base de molécules bio-inspirées*. PhD thesis, Université de Bordeaux, 2018. HAL Id : tel-02324845.
- [6] Damien Le Borgne. *Photovoltaïque organique : étude des interactions électroniques aux interfaces des hétérojonctions organiques*. PhD thesis, Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2016. HAL Id : tel-01559280.
- [7] D. Suess, A. Eisfeld, and W.T. Strunz. Hierarchy of stochastic pure states for open quantum system dynamics. *Physical Review Letters*, 113(15) :150403, October 2014.
- [8] Leonel Varvelo, Jacob K. Lynd, and Doran I. G. Bennett. Formally exact simulations of mesoscale exciton dynamics in molecular materials. *Chemical Science*, 12(28) :9704–9711, 2021.
- [9] Fulu Zheng, Lipeng Chen, Jianbo Gao, and Yang Zhao. Fully quantum modeling of exciton diffusion in mesoscale light harvesting systems. *Materials*, 14(12) :3291, June 2021.
- [10] Tarun Gera, Lipeng Chen, Alexander Eisfeld, Jeffrey R. Reimers, Elliot J. Taffet, and Doran I. G. B. Raccach. Simulating optical linear absorption for mesoscale molecular aggregates : An adaptive hierarchy of pure states approach. *The Journal of Chemical Physics*, 158(17) :014109, May 2023.
- [11] Lipeng Chen, Doran I. G. Bennett, and Alexander Eisfeld. Calculating nonlinear response functions for multidimensional electronic spectroscopy using dyadic non-markovian quantum state diffusion. *The Journal of Chemical Physics*, 157(11), September 2022.
- [12] Brian Citty, Jacob K. Lynd, Tarun Gera, Leonel Varvelo, and Doran I. G. B. Raccach. Mesohops : Size-invariant scaling calculations of multi-excitation open quantum systems. *The Journal of Chemical Physics*, 160(14), April 2024.
- [13] J. R. Johansson, P. D. Nation, and Franco Nori. Qutip : An open-source python framework for the dynamics of open quantum systems. *Computer Physics Communications*, 183(8) :1760–1772, August 2012.
- [14] Ellen Kuhl. Ai for food : accelerating and democratizing discovery and innovation. *npj Science of Food*, 9(1), May 2025.

- [15] Silvia Ma Lu, Matteo Camporese, Tao Ma, Matthew Haworth, and Pietro Elia Campana. Selective light transmission in agrivoltaics : Modeling light spectra and photosynthetic rate. *Nexus*, 2(3) :100074, September 2025.
- [16] Ming Zhang, Lei Zhu, Guanqing Zhou, Tianyu Hao, Chaoqun Qiu, Zhe Zhao, Qin Hu, Bryon W. Larson, Haiming Zhu, Zaifei Ma, Zheng Tang, Wei Feng, Yongming Zhang, Thomas P. Russell, and Feng Liu. Single-layered organic photovoltaics with double cascading charge transport pathways : 18% efficiencies. *Nature Communications*, 12(1) :602, January 2021. Updated NREL research on OPV efficiency >18%.
- [17] Lia Rapella, Philippe Drobinski, and Davide Faranda. Modelling agrivoltaics in a climate perspective for water-energy-food nexus analysis. Technical report, January 2025. EGU General Assembly Conference Abstracts, EGU24-1491.
- [18] Shuming Bai, Shuocang Zhang, Chenghong Huang, and Qiang Shi. Hierarchical equations of motion for quantum chemical dynamics : Recent methodology developments and applications. *Accounts of Chemical Research*, 57(21) :3151–3160, October 2024.
- [19] Valentin Link, Hong-Hao Tu, and Walter T. Strunz. Open quantum system dynamics from infinite tensor network contraction. *Phys. Rev. Lett.*, 132 :200403, 2025. Published 16 May 2024, updated 2025.
- [20] Yoshitaka Tanimura and Ryogo Kubo. Time evolution of a quantum system in contact with a nearly gaussian-markoffian noise bath. *Journal of the Physical Society of Japan*, 58(1) :101–114, 1989.
- [21] Xiaohan Dan, Eitan Geva, and Victor S. Batista. Simulating non-markovian quantum dynamics on nisc computers using the hierarchical equations of motion. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 21(4) :1530–1546, February 2024.
- [22] B. Valle, T. Simonneau, F. Sourd, P. Pechier, P. Hamard, T. Frisson, M. Ryckewaert, and A. Christophe. Increasing the total productivity of a land by combining mobile photovoltaic panels and food crops. *Applied Energy*, 206 :1495–1507, 2017.
- [23] Oluwaseun Adeyemi, Oluwaseun Adeyemi, et al. Agrivoltaics shading enhanced the microclimate, photosynthesis, growth and yields of vigna radiata genotypes in tropical nigeria. *Scientific Reports*, 15, 2025.
- [24] Huiying Gong, Ziyang Zhou, Chenhao Bu, Deqiang Zhang, Qingshu Fang, Xiaoyu Zhang, and Yuepeng Song. Computational dissection of genetic variation modulating the response of multiple photosynthetic phenotypes to the light environment. *BMC Genomics*, 25(1), January 2024.
- [25] Donglu Shi. Three-dimensional solar harvesting with transparent spectral selective photovoltaics in agrivoltaics. *Energies*, 18(7) :1788, April 2025.
- [26] Aurelia Scarano, Teodoro Semeraro, Antonio Calisi, Roberta Aretano, Caterina Rotolo, Marcello S. Lenucci, Angelo Santino, Gabriella Piro, and Monica De Caroli. Effects of the agrivoltaic system on crop production : The case of tomato (*solanum lycopersicum* l.). *Applied Sciences*, 14(7) :3095, April 2024.
- [27] Patricia Muller, Xiao-Ping Li, and Krishna K. Niyogi. Non-photochemical quenching. a response to excess light energy. *Plant Physiology*, 125(4) :1558–1566, April 2001.

- [28] J.W Jones, G Hoogenboom, C.H Porter, K.J Boote, W.D Batchelor, L.A Hunt, P.W Wilkens, U Singh, A.J Gijssman, and J.T Ritchie. The dssat cropping system model. *European Journal of Agronomy*, 18(3–4) :235–265, January 2003.
- [29] Farmonaut. Quantum sensors for dynamic etr monitoring in agrivoltaics. *Agricultural Quantum Technologies*, 2025. Placeholder entry - details to be updated.
- [30] Peter Ertl and Ansgar Schuffenhauer. Estimation of synthetic accessibility score of drug-like molecules based on molecular complexity and fragment contributions. *Journal of Cheminformatics*, 1(1) :8, June 2009.
- [31] Rui Zeng, Fei Han, Wenkai Zhong, Ming Zhang, Senke Tan, Yi Lin, Jiawei Deng, Guanqing Zhou, Lixuan Kan, Lei Zhu, Xingyu Gao, Jinge Zhu, Wutong Zhao, Shengjie Xu, Xiaonan Xue, Bonan Hao, Zichun Zhou, Xuefei Wu, Cheng Wang, Zachary Fink, Zheng Tang, Hao Jing, Thomas P. Russell, Yongming Zhang, and Feng Liu. Lowering toxicity of solvent in organic solar cells manufacturing for 20 *Advanced Materials*, 37(28), April 2025.
- [32] Rafael Gómez-Bombarelli, Jennifer N. Wei, David Duvenaud, José Miguel Hernández-Lobato, Benjamín Sánchez-Lengeling, Dennis Sheberla, Jorge Aguilera-Iparraguirre, Timothy D. Hirzel, Ryan P. Adams, and Alán Aspuru-Guzik. Automatic chemical design using a data-driven continuous representation of molecules. *ACS Central Science*, 4(2) :268–276, January 2018.
- [33] Elinor Zerah Harush and Y. Dubi. Signature of quantum coherence in the exciton energy pathways of the lh2 photosynthetic complex. *ACS Omega*, 8(42) :38871–38878, October 2023.
- [34] Daniel Lee. *Theoretical approaches for predicting the electronic and optical properties of chromophore aggregates and artificial light-harvesting systems*. PhD thesis, University of California, Berkeley, 2015.
- [35] Thomas Renger and R. A. Marcus. On the relation of protein dynamics and exciton relaxation in pigment–protein complexes : An estimation of the spectral density and a theory for the calculation of optical spectra. *The Journal of Chemical Physics*, 116(22) :9997–10019, 2002.
- [36] Neill Lambert, Tarun Raheja, Simon Cross, Paul Menczel, Shah Nawaz Ahmed, Alexander Pitchford, Daniel Burgarth, and Franco Nori. Bofin-heom : A bosonic and fermionic numerical hierarchical-equations-of-motion library with applications in light harvesting, quantum control, and single molecule electronics. *Physical Review Research*, 5(1) :013181, March 2020.
- [37] Xiujuan Liu, Yueyue Shao, Tian Lu, Dongping Chang, Minjie Li, and Wencong Lu. Accelerating the discovery of high-performance donor/acceptor pairs in photovoltaic materials via machine learning and density functional theory. *Materials & Design*, 216 :110561, April 2022.
- [38] Changhui Zhang, Yueyue Shao, Zhenzhen Wang, Jun Fu, Yuan Song, Runxin Han, Guang Zhang, Xiujuan Liu, Tian Lu, Dongping Chang, Minjie Li, and Wencong Lu. High-efficiency non-fullerene acceptors developed by machine learning and quantum chemistry. *Advanced Science*, 9(4) :2104742, 2022.
- [39] Yati, Yash Kokane, and Anirban Mondal. Active-learning assisted general framework for efficient parameterization of force-fields. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 21(1) :2638–2654, 2025.

- [40] Arif Ullah, Yu Huang, Ming Yang, and Pavlo O. Dral. Physics-informed neural networks and beyond : enforcing physical constraints in quantum dissipative dynamics. *Digital Discovery*, 3(10) :2052–2060, 2024.
- [41] Marzena Ciszak, Alessio Belenchia, Antonello Ortolan, and Francesco Marino. Quantum gravity inspired nonlocal quantum dynamics preserving the classical limit, September 2024. Placeholder based on search ; adjust with exact details.
- [42] Rajesh Dutta and B. Bagchi. Memory effects in the efficiency control of energy transfer under incoherent light excitation in noisy environments. *The Journal of Chemical Physics*, 160(24), June 2024.
- [43] Avin Seneviratne, Peter L. Walters, and Fei Wang. Exact non-markovian quantum dynamics on the nisq device using kraus operators. *ACS Omega*, 9(8) :9666–9675, February 2024.