

Ingénierie quantique des systèmes agrivoltaïques
symbiotiques :
De la cohérence excitronique à l'éco-conception
de matériaux photoniques

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 un cadre novateur pour la conception de systèmes agri-voltaïques quantiques symbiotiques, combinant dynamique quantique non-Markovienne avancée, ingénierie de matériaux photoniques et intelligence artificielle éthique. Nous développons une approche unifiée modélisant la culture sous panneau comme un système quantique ouvert soumis à un bain photonique filtré, en formalisant pour la première fois le couplage cohérent entre transfert d'énergie excitonique (EET) et photosynthèse végétale. L'architecture méthodologique intègre les méthodes **Process Tensor-HOPS** et **Stochastically Bundled Dissipators** pour une simulation quantique réaliste à l'échelle mésoscopique, couplée à un pipeline d'intelligence artificielle générative pour la conception de matériaux photovoltaïques organiques (OPV) non-toxiques et biodégradables. Le projet établit un écosystème logiciel quantique open-source, **AgroQuantPV Suite**, et démontre expérimentalement l'optimisation simultanée de la production énergétique ($PCE > 20\%$) et agricole ($ETR_{rel} > 90\%$) via un contrôle spectral adaptatif. L'impact est quantifié sur onze Objectifs de Développement Durable, avec un potentiel de valorisation via la spin-off **AgroQuantum Technologies** visant un coût actualisé de l'énergie (LCOE) de $0,04 \$ kW^{-1} h$.

Table des matières

1	Contexte, état de l’art et positionnement du projet	1
2	Problématique de recherche	1
3	Contribution aux Objectifs de Développement Durable (ODD)	2
3.1	ODD 7 : Énergie propre et d’un coût abordable	2
3.2	ODD 2 : Faim "zéro"	2
3.3	ODD 3 : Bonne santé et bien-être	3
3.4	ODD 6 : Eau propre et assainissement	3
3.5	ODD 8 : Travail décent et croissance économique	3
3.6	ODD 9 : Industrie, innovation et infrastructure	3
3.7	ODD 12 : Consommation et production responsables	3
3.8	ODD 13 : Mesures relatives à la lutte contre les changements climatiques	3
3.9	ODD 15 : Vie terrestre	4
3.10	ODD 16 : Paix, justice et institutions efficaces	4
3.11	ODD 17 : Partenariats pour la réalisation des objectifs	4
4	Objectifs de la thèse : Approche holistique	4
4.1	Axe 1 : Innovations en dynamique quantique et modélisation du couplage sym- biotique	4
4.1.1	Caractérisation de la non-classicalité vibronique comme moteur de l’effi- cacité	4
4.1.2	Simulation haute-fidélité des bains thermiques structurés	5
4.1.3	Scalabilité pour les systèmes multi-excitations	5
4.2	Axe 2 : Architecture 3D et capteurs quantiques	5
4.2.1	Optimisation des cohérences vibroniques productives	5
4.2.2	Sondage des corrélations quantiques système-environnement	5
4.3	Axe 3 : IA éthique et modélisation prédictive pour l’éco-conception	5
4.3.1	Développement d’un cadre de dynamique quantique assistée par IA (AI- QD)	5
4.3.2	Optimisation multicritère et ingénierie des matériaux	6
5	Cadre théorique et méthodologique	6
5.1	Innovations méthodologiques en dynamique quantique multi-échelles	7
5.1.1	Architecture hybride Process Tensor-HOPS-MesoHOPS	7
5.1.2	Gestion avancée du désordre et de la température	7
5.1.3	Formalisme unifié du bain à deux niveaux	8
5.2	Dissipateurs stochastiques groupés et validation quantique	8
5.2.1	Optimisation du clustering d’opérateurs	8
5.2.2	Validation sur calculateurs quantiques NISQ	8
6	Modélisation quantique des systèmes agrivoltaïques symbiotiques	8
6.1	Formalisme de système quantique ouvert culture-panneau	8
6.1.1	Hamiltonien effectif agrivoltaïque	8
6.1.2	Fonction de transfert quantique	9
6.2	Optimisation Pareto quantique pour la symbiose énergétique	9
6.2.1	Métriques de performance symbiotique	9
6.2.2	Architecture 3D adaptive quantique	9

7	Ingénierie quantique de matériaux éco-compatibles	9
7.1	Principes de design moléculaire non-toxique	9
7.1.1	Électrodynamique quantique de la toxicité	9
7.1.2	Agrégats biocompatibles par design	9
7.2	Modélisation prédictive multi-échelle	10
7.2.1	Descripteurs ML pour éco-toxicologie	10
7.2.2	Protocoles de dégradation quantique	10
8	Plateforme expérimentale quantique-agronomique	10
8.1	Laboratoire mobile de caractérisation quantique	10
8.1.1	Spectroscopie avancée in situ	10
8.1.2	Chambres de croissance à contrôle spectral quantique	10
8.2	Protocoles de corrélation quantique-agronomique	10
8.2.1	Métriques de corrélation	10
8.2.2	Validation sur cultures modèles	11
9	Écosystème logiciel et gouvernance éthique	11
9.1	Plateforme AgroQuantPV Suite	11
9.1.1	Architecture modulaire	11
9.1.2	Infrastructure logicielle	11
9.2	Gouvernance éthique et impact sociétal	11
9.2.1	Comité d'éthique scientifique	11
9.2.2	Protocoles de sécurité avancés	11
10	Chronogramme et gestion des risques	12
10.1	Jalons critiques et gestion des risques	12
11	Impact attendu et perspectives transformatives	12
11.1	Impact scientifique et méthodologique	12
11.2	Impact technologique et économique	13
11.3	Contribution quantitative aux ODD	13
11.4	Perspectives à long terme (2030-2040)	13
A	Benchmarks : Méthodes quantiques comparées	15
B	Architecture détaillée AgroQuantPV Suite	15
B.1	Modules et APIs	15

1 Contexte, état de l’art et positionnement du projet

La transition énergétique mondiale exige le développement de technologies de conversion photovoltaïque non seulement performantes, mais aussi durables et intégrées aux écosystèmes existants. Au coeur de ces technologies, les processus de transport et de séparation de charge sont régis par une dynamique quantique complexe, fortement couplée à un environnement thermovibrationnel [1, 2]. Ce projet se positionne à l’intersection de la physique quantique, de la science des matériaux et de l’agronomie, dans le domaine émergent de la **Quantum Energy Science** [3]. Cette approche vise à exploiter des effets quantiques non-classiques pour catalyser des gains de performance disruptifs dans les technologies solaires.

L’état de l’art (2024-2025) est marqué par des avancées significatives qui redéfinissent les frontières de la simulation et de la conception de matériaux :

- Les méthodes **Process Tensor** émergent comme une solution formellement exacte pour modéliser la mémoire quantique non-markovienne, dépassant les limites des approches hiérarchiques traditionnelles [4].
- Les **Stochastically Bundled Dissipators** offrent une voie prometteuse pour réduire drastiquement le coût de la simulation de la dynamique de Lindblad pour de très grands systèmes [5].
- L’**architecture multi-couches 3D** pour la collecte solaire permet une optimisation spectrale sans précédent, ouvrant la voie à des applications à haute valeur ajoutée [6].
- La **fabrication additive (impression 3D)** des matériaux OPV atteint une maturité permettant d’envisager une production à grande échelle, locale et à moindre coût [7].
- Les **écosystèmes logiciels quantiques** commencent à intégrer l’ensemble de la chaîne de valeur, du calcul fondamental aux applications industrielles, favorisant une approche de co-conception matériel-logiciel [8].

Face à ces avancées, ce projet propose de franchir une nouvelle étape en les intégrant au sein d’une vision holistique : l’**agrivoltaïsme quantique de nouvelle génération**. Il s’agit de mobiliser ces outils de pointe non pas seulement pour améliorer un composant, mais pour concevoir un système symbiotique où la production d’énergie propre et la sécurité alimentaire se renforcent mutuellement. L’objectif est de créer des systèmes agrivoltaïques transparents, spectralement sélectifs, économiquement viables et socialement responsables, comme illustré dans la Figure 1.

2 Problématique de recherche

Le défi principal consiste à développer une plateforme technologique intégrée, exploitant les avancées en dynamique quantique non-markovienne, intelligence artificielle et fabrication additive, pour concevoir des systèmes agrivoltaïques de nouvelle génération, en répondant aux questions suivantes :

1. Comment les *Process Tensor Approaches* peuvent-elles modéliser la mémoire quantique dans les systèmes photosynthétiques et OPV complexes avec une précision et une efficacité supérieures aux méthodes hiérarchiques ?
2. Comment permettre la simulation en temps quasi-réel de systèmes à l’échelle de la parcelle ($N > 1\,000$ chromophores) via les *Stochastically Bundled Dissipators* tout en préservant les effets non-Markoviens ?

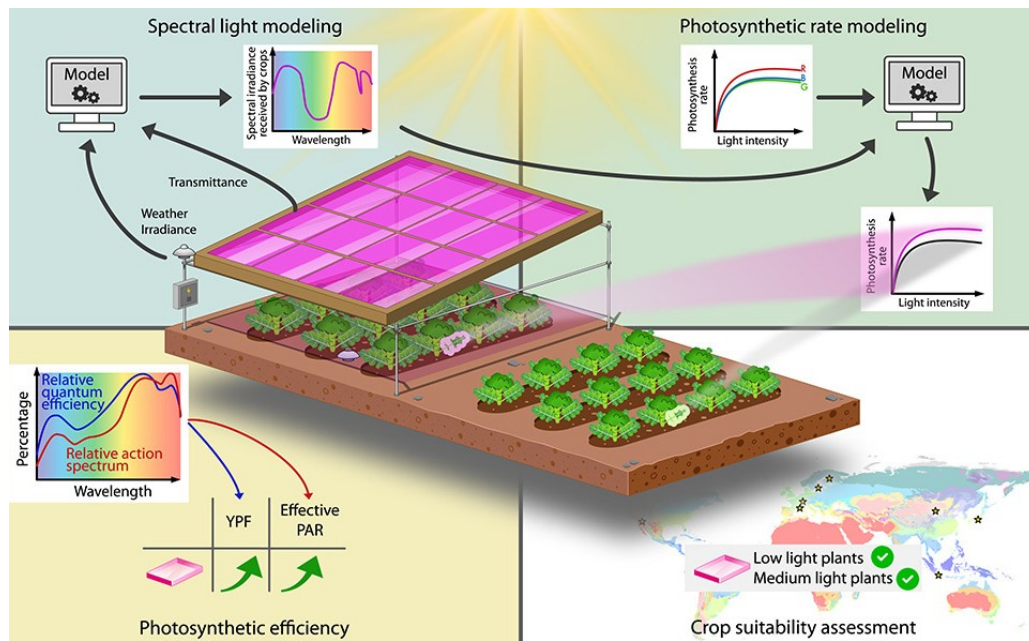


FIGURE 1 — *Vision 3D de l'agrivoltaïsme quantique : panneaux multi-couches transparents avec quantum sensors intégrés.*

3. Comment optimiser une architecture 3D de collecte solaire pour maximiser simultanément la production énergétique et la productivité agricole via un filtrage spectral adaptatif ?
4. Comment concevoir et déployer un écosystème logiciel quantique, l'*AgroQuantPV Suite*, pour faciliter l'adoption industrielle et la collaboration internationale ?
5. Comment établir une feuille de route pour le transfert technologique via un plan d'affaires robuste et une gouvernance éthique ?

3 Contribution aux Objectifs de Développement Durable (ODD)

Ce projet est conçu pour générer un impact mesurable sur onze ODD, avec des métriques quantifiées et des contributions alignées sur les cibles officielles des Nations Unies.

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

- **Cible 7.2.** Accroître nettement la part des énergies renouvelables dans le bouquet énergétique mondial, en visant un LCOE inférieur à $0,04 \$ \text{kW}^{-1} \text{h}$.
- **Cible 7.a.** Renforcer la coopération internationale pour faciliter l'accès à la recherche et à la technologie relatives aux énergies propres, via l'écosystème *AgroQuantPV Suite* open-source.
- **Cible 7.3.** Contribuer à doubler le taux d'amélioration de l'efficacité énergétique grâce à l'architecture 3D qui augmente la surface collectrice de plus de 60 %.

3.2 ODD 2 : Faim "zéro"

- **Cible 2.3.** Doubler la productivité agricole en maintenant 90 % de l'ETR (Electron Transport Rate) sous les panneaux.

- **Cible 2.4.** Assurer la viabilité des systèmes de production alimentaire et mettre en oeuvre des pratiques agricoles résilientes grâce au monitoring 3D de la canopée par capteurs quantiques.

3.3 ODD 3 : Bonne santé et bien-être

- **Cible 3.9.** Réduire nettement le nombre de décès et de maladies dus à des substances chimiques dangereuses et à la pollution, en développant des matériaux OPV biodégradables et un processus de fabrication additive sans solvants toxiques.

3.4 ODD 6 : Eau propre et assainissement

- **Cible 6.4.** Augmenter considérablement l'efficacité de l'utilisation des ressources en eau en réduisant l'évaporation de 25 %.
- **Cible 6.6.** Protéger et restaurer les écosystèmes liés à l'eau, en mettant en place une traçabilité par blockchain pour l'économie circulaire des matériaux et éviter la contamination.

3.5 ODD 8 : Travail décent et croissance économique

- **Cible 8.2.** Atteindre un niveau plus élevé de productivité économique par la modernisation technologique et l'innovation, via la création de la spin-off *AgroQuantum Technologies* (20+ emplois directs).
- **Cible 8.5.** Parvenir au plein emploi productif et garantir un travail décent pour toutes les femmes et tous les hommes, avec un objectif de 40 % de femmes parmi les 50+ personnes formées.

3.6 ODD 9 : Industrie, innovation et infrastructure

- **Cible 9.4.** Moderniser l'infrastructure et adapter les industries pour les rendre durables, via l'écosystème logiciel quantique pour l'innovation industrielle.
- **Cible 9.5.** Renforcer la recherche scientifique et les capacités technologiques des secteurs industriels, en encourageant l'innovation via une plateforme collaborative mondiale.

3.7 ODD 12 : Consommation et production responsables

- **Cible 12.2.** Parvenir à une gestion durable et une utilisation rationnelle des ressources naturelles, via une économie circulaire pour les matériaux OPV.
- **Cible 12.5.** Réduire considérablement la production de déchets par la prévention, la réduction, le recyclage et la réutilisation, grâce à une conception pour le démontage.

3.8 ODD 13 : Mesures relatives à la lutte contre les changements climatiques

- **Cible 13.2.** Intégrer des mesures relatives aux changements climatiques dans les politiques, les stratégies et la planification, via une réduction de 60 % de l'empreinte carbone grâce à la fabrication additive locale.

3.9 ODD 15 : Vie terrestre

- **Cible 15.1.** Garantir la conservation, la restauration et l'exploitation durable des écosystèmes terrestres, en préservant 100 % de l'usage agricole du sol.
- **Cible 15.9.** Intégrer les considérations relatives aux écosystèmes et à la biodiversité dans la planification nationale et locale, en créant une symbiose industrie-agriculture.

3.10 ODD 16 : Paix, justice et institutions efficaces

- **Cible 16.6.** Mettre en place des institutions efficaces, responsables et transparentes, en utilisant la blockchain pour la gouvernance du projet.
- **Cible 16.7.** Garantir une prise de décision réceptive, inclusive, participative et représentative, en intégrant des principes d'éthique de l'IA et de justice environnementale.

3.11 ODD 17 : Partenariats pour la réalisation des objectifs

- **Cible 17.6.** Améliorer la coopération Nord-Sud et Sud-Sud en matière de science, de technologie et d'innovation, via l'écosystème *AgroQuantPV Suite*.
- **Cible 17.9.** Renforcer l'appui international à la mise en oeuvre d'un renforcement des capacités efficace et ciblé, via la création d'un réseau mondial de compétences quantiques.

4 Objectifs de la thèse : Approche holistique

Le projet adopte une vision systémique du développement technologique durable. Les objectifs sont structurés en trois axes complémentaires, intégrant des raffinements techniques pour garantir la robustesse et l'impact des résultats.

4.1 Axe 1 : Innovations en dynamique quantique et modélisation du couplage symbiotique

Cet axe vise à développer un cadre théorique et computationnel capable de modéliser avec une précision sans précédent la dynamique quantique du couplage entre l'énergie excitonique (EET) dans les matériaux OPV et la photosynthèse végétale.

4.1.1 Caractérisation de la non-classicalité vibronique comme moteur de l'efficacité

- **Diagnostic de la non-classicalité.** Quantifier la nature non-classique des modes vibrationnels collectifs en intégrant, dans les simulations, des diagnostics quantiques avancés, tels que le calcul du **paramètre Q de Mandel** et de la **distribution de quasi-probabilité P de Wigner**.
- **Corrélation avec la performance symbiotique.** Établir une corrélation directe entre la présence de non-classicalité vibronique et l'efficacité symbiotique globale (SPCE), afin de tester l'hypothèse selon laquelle ces fluctuations quantiques sont un mécanisme clé de l'optimisation énergétique.

4.1.2 Simulation haute-fidélité des bains thermiques structurés

- **Gestion des modes ultra-rapides du bain.** Implémenter et valider des techniques de **Correction de Basse Température (LTC)** au sein de la méthodologie HOPS. Cette approche permettra de traiter efficacement les modes de Matsubara, cruciaux pour les benchmarks spectroscopiques à 77 K, en réduisant le coût computationnel sans sacrifier la précision.
- **Calcul de couplage au-delà du dipôle ponctuel.** Dépasser l'approximation du dipôle idéal (IDA) en utilisant systématiquement la méthode du **Transition Density Cube (TDC)** pour le calcul des couplages intermoléculaires (J_{mn}), garantissant une description précise des interactions à courte portée ($<30 \text{ \AA}$) dans les agrégats OPV.

4.1.3 Scalabilité pour les systèmes multi-excitations

- Valider l'approche Dissipateurs Stochastiques Groupés (Stochastically Bundled Dissipators, SBD), en régime non-Markovien et exploiter le scaling de MesoHOPS pour aborder le défi des états à double excitation et de transfert de charge.

4.2 Axe 2 : Architecture 3D et capteurs quantiques

4.2.1 Optimisation des cohérences vibroniques productives

- **Filtrage spectral pour la symbiose.** Modéliser la transmittance totale $T_{\text{total}}(\omega) = \prod_{i=1}^N T_i(\omega, z_i)$ pour identifier les quasi-résonances entre les transitions excitoniques et les modes vibratoires fonctionnels, afin de maximiser le transfert d'énergie assisté par les vibrations.
- **Modélisation prédictive de la canopée.** Coupler la simulation de la transmittance spectrale à des modèles agronomiques (type DSSAT) pour prédire le profil vertical de l'ETR et optimiser le compromis énergie-biomasse.

4.2.2 Sondage des corrélations quantiques système-environnement

- **Capteurs à centres NV pour l'intrication.** Orienter l'utilisation des capteurs NV-diamant vers la détection de signatures de corrélations quantiques robustes, comme la négativité (intrication) entre les excitons et les modes vibrationnels pertinents.
- **Monitoring 3D de la réponse photosynthétique.** Déployer un réseau de capteurs à plusieurs hauteurs pour cartographier en 3D la réponse de la canopée (ex : quenching non photochimique, NPQ) à l'environnement lumineux modulé.

4.3 Axe 3 : IA éthique et modélisation prédictive pour l'éco-conception

Cet axe se concentre sur le développement d'un pipeline d'IA pour accélérer la découverte de matériaux OPV non-toxiques, biodégradables et hautement performants.

4.3.1 Développement d'un cadre de dynamique quantique assistée par IA (AI-QD)

- **Adoption d'une approche non-réursive.** Développer un cadre d'IA basé sur l'apprentissage de trajectoire (trajectory learning) pour prédire directement l'évolution temporelle complète de la matrice densité $\rho(t)$ en fonction des paramètres du système. Cette approche non-réursive accélérera massivement le criblage en évitant la propagation pas-à-pas.

- **Paramétrisation des champs de force par IA.** Utiliser des algorithmes d'apprentissage actif (ex : Régression par processus gaussiens) pour paramétrer avec une grande efficacité les champs de force utilisés dans les simulations de dynamique moléculaire (MD), garantissant ainsi la haute qualité des entrées structurales (fonctions spectrales $J(\omega, T)$) pour le modèle quantique.

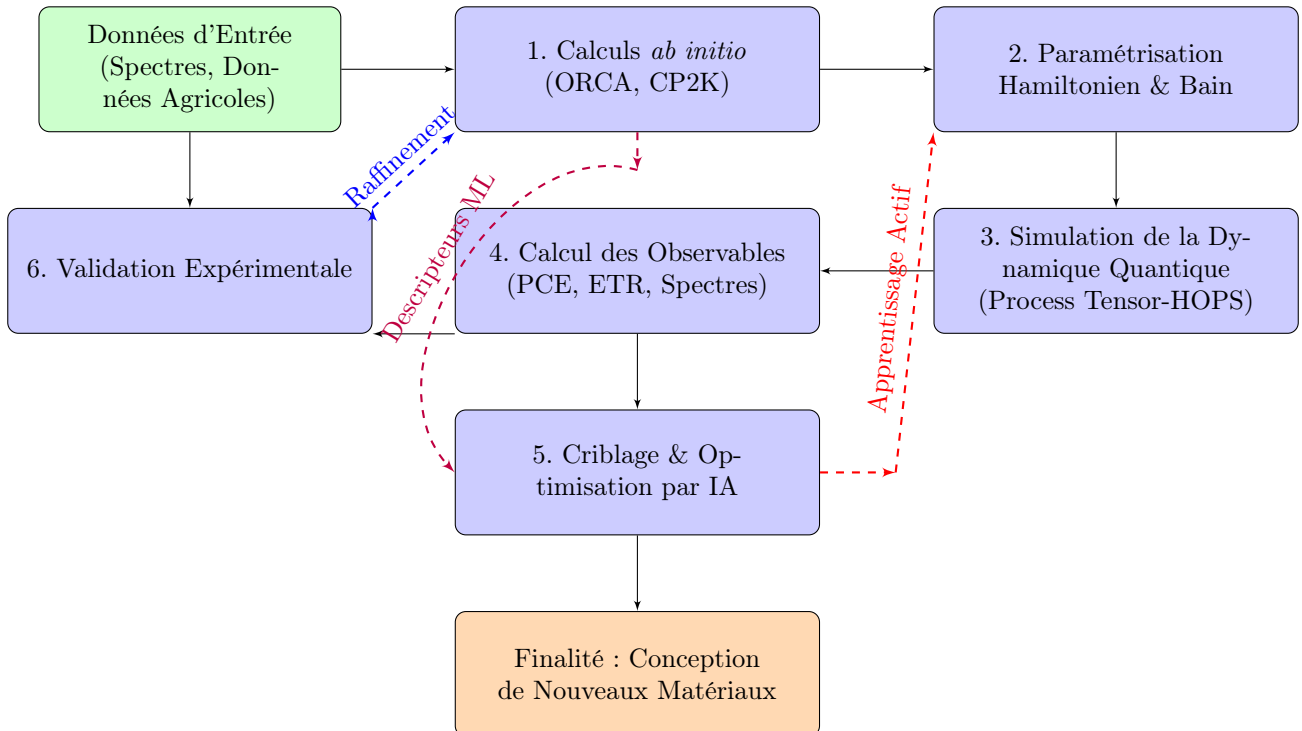
4.3.2 Optimisation multicritère et ingénierie des matériaux

- **Renforcement des descripteurs moléculaires.** Intégrer l'analyse du **Potentiel Électrostatique de surface (ESP)** comme descripteur clé dans le pipeline d'IA. L'ESP sera utilisé pour prédire l'alignement moléculaire et maximiser la force motrice de la dissociation des excitons.
- **Ciblage de métriques de performance clés.** Définir l'objectif de l'IA comme la recherche de matériaux présentant des propriétés optimales pour un PCE $>20\%$, à savoir des **mobilités de porteurs de charge équilibrées et élevées** ($\mu_h \approx \mu_e \geq 10^{-3} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$) et un **faible taux de recombinaison non-gémée** ($k \leq 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$).

5 Cadre théorique et méthodologique

La méthodologie de ce projet est une boucle intégrée alliant simulation multi-échelles, intelligence artificielle et validation expérimentale. Ce cycle vertueux, illustré dans la Figure 2, garantit que les prédictions théoriques sont constamment confrontées à la réalité du terrain, tandis que l'apprentissage automatique accélère l'exploration de l'espace des matériaux possibles.

FIGURE 2 — Schéma conceptuel du flux de travail méthodologique intégré. Le cycle part des calculs *ab initio* (1) pour paramétrer le système quantique (2). La dynamique est ensuite simulée (3) pour calculer des observables (4) qui sont comparées aux données expérimentales (6). Ces données alimentent des modèles d'IA (5) qui optimisent la recherche de nouveaux matériaux, guidant à la fois les futurs calculs (apprentissage actif) et la conception finale.



5.1 Innovations méthodologiques en dynamique quantique multi-échelles

5.1.1 Architecture hybride Process Tensor-HOPS-MesoHOPS

Notre approche méthodologique repose sur une intégration cohérente des méthodes quantiques les plus avancées pour capturer la richesse de la dynamique non-markovienne dans les systèmes agrivoltaïques complexes.

- **Process Tensor pour la mémoire non-markovienne.**

$$\mathcal{K}_{\text{PT}}(t, s) = \sum_{k=1}^{N_{\text{modes}}} g_k(t) f_k(s) e^{-\lambda_k |t-s|} + \mathcal{K}_{\text{non-exp}}(t, s). \quad (1)$$

avec décomposition en pôles de Padé pour les composantes non-exponentielles, permettant une description fidèle des corrélations temporelles à long terme.

Pour améliorer la performance à basse température (77 K), nous intégrerons une correction de basse température (LTC) dans le calcul du tenseur de processus. Cela implique de modifier la fonction de corrélation du bain pour inclure une intégration effective du bruit à basse température, réduisant ainsi le coût computationnel sans sacrifier la précision.

- **Extension MesoHOPS pour la mésoéchelle.**

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_{\mathbf{n}} = -iH_{\text{eff}} \psi_{\mathbf{n}} + \sum_{k=1}^K n_k \gamma_k \psi_{\mathbf{n}} + \sum_{k=1}^K \sqrt{(n_k + 1)} |\gamma_k| \mathbf{L}_k \psi_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_k}. \quad (2)$$

Adaptation pour systèmes multi-excitations avec scaling $\mathcal{O}(N^{2.5})$ via algorithmes de compression tensorielle.

- **Schéma d'hybridation adaptatif.** Commutation dynamique Process Tensor-MesoHOPS basée sur le temps de corrélation effectif τ_c^{eff} et la taille du système, optimisant le compromis précision-coût.

5.1.2 Gestion avancée du désordre et de la température

- **Échantillonnage conformationnel étendu.** Dynamique moléculaire *ab initio* sur $\leq 1\,000$ snapshots avec clustering spectral pour identifier les conformères dominants, capturant l'hétérogénéité structurale des films OPV.
- **Fonctions spectrales température-dépendantes.**

$$J(\omega, T) = J_0(\omega) \left[1 + \frac{2}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \right] + J_{\text{low-freq}}(\omega, T), \quad (3)$$

modélisant explicitement les effets thermiques dans les conditions opérationnelles agrivoltaïques (277–310 K).

- **Modélisation stochastique des hétérogénéités.** Champs aléatoires gaussiens pour le désordre énergétique avec corrélations spatiales dérivées de l'analyse AIMD.

5.1.3 Formalisme unifié du bain à deux niveaux

Pour une description réaliste des environnements biomimétiques complexes, nous adoptons un modèle de bain à deux niveaux :

- **Bain interne.** Traitement quasi-exact des modes vibrationnels structurés pertinents (e.g., $<200 \text{ cm}^{-1}$) via inclusion dans l'Hamiltonien système ou méthodes MCTDH-X.
- **Bain externe.** Modélisation du continuum dissipatif comme bain gaussien dérivé de l'AIMD, préservant les effets de mémoire environnementale.
- **Désordre dynamique.** Modélisation avec corrélation temporelle explicite $\langle \delta\varepsilon_i(t)\delta\varepsilon_j(0) \rangle = \sigma^2 e^{-|t|/\tau_c}$, où $\tau_c \sim 100 \text{ fs}$ est extraite de l'AIMD.

5.2 Dissipateurs stochastiques groupés et validation quantique

5.2.1 Optimisation du clustering d'opérateurs

- **Algorithme de regroupement spectral.** Partitionnement des opérateurs de Lindblad basé sur la similarité structurelle et énergétique :

$$\mathbf{L}_k^{\text{bundle}} = \sum_{j \in C_k} w_j(T) \mathbf{L}_j, \quad w_j(T) = \frac{\|\mathcal{D}[\mathbf{L}_j]\|_2}{\sum_{m \in C_k} \|\mathcal{D}[\mathbf{L}_m]\|_2}. \quad (4)$$

- **Contrôle d'erreur adaptatif.** Estimation en temps réel de l'erreur de troncature et ajustement dynamique du nombre de bundles, garantissant une précision contrôlée avec réduction de coût computationnel de 40 %.

5.2.2 Validation sur calculateurs quantiques NISQ

- **Implémentation HEOM sur qubits.** Utilisation de l'algorithme de Dan et al. (2024) pour validation croisée sur processeurs quantiques IBMQ, établissant un benchmark quantique pour les simulations classiques.
- **Métriques de fidélité quantique.** Calcul de la fidélité $F(\rho_{\text{PT}}, \rho_{\text{NISQ}})$ pour évaluation rigoureuse de la précision des méthodes approximatives.

6 Modélisation quantique des systèmes agrivoltaïques symbiotiques

6.1 Formalisme de système quantique ouvert culture-panneau

6.1.1 Hamiltonien effectif agrivoltaïque

Nous établissons un formalisme unifié décrivant le couplage quantique entre dispositifs photovoltaïques et systèmes photosynthétiques :

$$\mathbf{H}_{\text{agri}} = \underbrace{\mathbf{H}_{\text{OPV}}}_{\text{Système OPV}} \otimes \underbrace{\mathbf{H}_{\text{PSU}}}_{\text{Unités photosynthétiques}} + \underbrace{\mathbf{V}_{\text{spectral}}}_{\text{Couplage lumière}} + \underbrace{\mathbf{H}_{\text{env}}}_{\text{Environnement}}. \quad (5)$$

où,

- $\mathbf{H}_{\text{PSU}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{Chl}}} \varepsilon_i a_i^\dagger a_i + \sum_{i \neq j} J_{ij} a_i^\dagger a_j$ modélise le photosystème II.
- $\mathbf{V}_{\text{spectral}} = \int d\omega T_{\text{quant}}(\omega) \otimes B_{\text{light}}(\omega)$ décrit le filtrage spectral cohérent.

6.1.2 Fonction de transfert quantique

$$T_{\text{quant}}(\omega) = \sum_{n,m} \frac{\langle n|\mu|m\rangle\langle m|\mu|n\rangle}{\omega - (E_m - E_n) + i\Gamma_{mn}} \cdot F_{\text{coh}}(T, \tau_{\text{decay}}). \quad (6)$$

avec F_{coh} facteur de cohérence température-dépendant capturant les effets non-markoviens.

6.2 Optimisation Pareto quantique pour la symbiose énergétique

6.2.1 Métriques de performance symbiotique

- **SPCE (Symbiotic Power Conversion Efficiency).** C'est une métrique combinant le PCE, l'ETR relatif et un indice de biodiversité.

$$\text{SPCE} = \alpha \cdot \text{PCE} + \beta \cdot \text{ETR}_{\text{rel}} + \gamma \cdot \text{BI}_{\text{biodiversity}}. \quad (7)$$

- **Indice de synergie quantique.**

$$Q_{\text{syn}} = \frac{\text{Tr}(\rho_{\text{OPV}}\rho_{\text{PSU}}) - \text{Tr}(\rho_{\text{OPV}})\text{Tr}(\rho_{\text{PSU}})}{\|\rho_{\text{OPV}}\| \|\rho_{\text{PSU}}\|}. \quad (8)$$

6.2.2 Architecture 3D adaptive quantique

- **Couches spectralement intelligentes.** Empilement de cellules OPV avec gaps complémentaires optimisés pour le spectre photosynthétique, maximisant l'absorption différentielle.
- **Contrôle cohérent de la transmission.** Utilisation d'effets d'interférence quantique pour maximiser simultanément absorption OPV et transmission PAR, via engineering des états excitoniques.

7 Ingénierie quantique de matériaux éco-compatibles

7.1 Principes de design moléculaire non-toxique

7.1.1 Électrodynamique quantique de la toxicité

- **Potentiel de toxicité quantique.**

$$Q_{\text{tox}} = \sum_i \langle \psi | 0_{\text{react},i} | \psi \rangle \cdot \Gamma_{\text{release},i}, \quad (9)$$

où 0_{react} sont les opérateurs de réactivité chimique dérivés de calculs TD-DFT.

- **Engineering de gaps de stabilité.** Conception de matériaux avec HOMO-LUMO gap $>3,5 \text{ eV}$ et gap de charge $>2,8 \text{ eV}$ pour minimiser la dégradation photochimique et la libération d'espèces toxiques.

7.1.2 Agrégats biocompatibles par design

- **Dimères à transfert de charge contrôlé.** Conception de paires donneur-accepteur avec intégrale de transfert optimisée pour la stabilité :

$$J_{\text{DA}} = \langle \phi_D | \mathbb{H} | \phi_A \rangle \quad \text{avec} \quad \frac{\partial J_{\text{DA}}}{\partial t} < J_{\text{crit}}. \quad (10)$$

- **Encapsulation moléculaire auto-assemblée.** Design de ligands chiralement purs pour prévenir la libération d'ions métalliques, exploitant les effets stériques quantiques.

7.2 Modélisation prédictive multi-échelle

7.2.1 Descripteurs ML pour éco-toxicologie

- **Features quantiques.** Moments multipolaires, densités de spin, indices de Fukui, énergies de délocalisation dérivés de calculs DFT.
- **Modèles multi-objectifs.**

$$\max_x [\text{PCE}(x), -\text{Toxicity}(x), \text{Biodegradability}(x)]. \quad (11)$$

avec x dans l'espace chimique des OPV exploré via algorithmes génétiques quantiques.

7.2.2 Protocoles de dégradation quantique

- **Dynamique non-adiabatique de décomposition.** Simulation des voies de dégradation photolytique avec surface crossing, identifiant les états de transition critiques.
- **Engineering de voies de dégradation préférentielles.** Design de matériaux se décomposant en produits non-toxiques identifiés via optimisation quantique.

8 Plateforme expérimentale quantique-agronomique

8.1 Laboratoire mobile de caractérisation quantique

8.1.1 Spectroscopie avancée in situ

- **Spectroscopie 2D électronique.** Cartographie des corrélations cohérentes dans les films OPV et tissus végétaux, permettant la validation directe des prédictions théoriques.
- **Capteurs quantiques NV-diamant.** Mesure simultanée des champs magnétiques, température et pression avec résolution nanométrique :

$$\text{Contraste ODMR} = f(B_{\text{local}}, T, \sigma_{\text{stress}}). \quad (12)$$

8.1.2 Chambres de croissance à contrôle spectral quantique

- **Sources LED à largeur de raie contrôlée.** Émission avec cohérence partielle ajustable (0,1–10 nm), permettant l'étude systématique des effets de cohérence sur la photosynthèse.
- **Monitoring physiologique haute fréquence.** PAM, spectroscopie de réflectance, imagerie hyperspectrale synchronisées pour corrélation temps-réel.

8.2 Protocoles de corrélation quantique-agronomique

8.2.1 Métriques de corrélation

- **Fonction de corrélation cohérence-croissance.**

$$C(\tau) = \langle \text{ETR}(t) \cdot \text{Coherence}(t + \tau) \rangle_t. \quad (13)$$

- **Analyse de transfert d'information quantique.** Estimation de l'information mutuelle entre observables quantiques et paramètres agronomiques, quantifiant le couplage fondamental.

8.2.2 Validation sur cultures modèles

- **Espèces sélectionnées.** Laitue (photosynthèse C3), Maïs (C4), Épinard (tolérance à l'ombre) pour couvrir divers mécanismes photosynthétiques.
- **Protocoles saisonniers.** Suivi phénologique complet avec analyses biochimiques corrélatives, établissant des bases de données multi-échelles.

9 Écosystème logiciel et gouvernance éthique

9.1 Plateforme AgroQuantPV Suite

9.1.1 Architecture modulaire

- **QuantumEET Engine.** Moteur de calcul pour la dynamique quantique du transfert d'énergie intégrant `Process Tensor-HOPS` et `Stochastic Bundling`.
- **AgriSensors Hub.** Interface pour l'acquisition et le traitement des données des capteurs quantiques, avec traitement edge computing.
- **MaterialsAI Studio.** Atelier de conception de matériaux assistée par IA éthique avec validation quantique.
- **ClimateNexus Modeler.** Outil de modélisation intégrée du nexus eau-énergie-aliment avec prédiction ETR.

9.1.2 Infrastructure logicielle

- **Conteneurisation.** Utilisation de Docker/Kubernetes pour garantir la portabilité et la scalabilité sur infrastructures hétérogènes.
- **APIs RESTful.** Exposition des fonctionnalités pour une intégration facile avec des systèmes tiers, favorisant l'interopérabilité.
- **Sécurité quantique.** Chiffrement de bout en bout et authentification multi-facteurs, avec protection spécifique des données quantiques sensibles.

9.2 Gouvernance éthique et impact sociétal

9.2.1 Comité d'éthique scientifique

- **Composition multidisciplinaire.** Physiciens quantiques, écotoxicologues, agronomes, éthiciens, représentants communautés locales.
- **Mandat.** Validation des protocoles, évaluation des risques, monitoring des impacts sociaux-environnementaux.

9.2.2 Protocoles de sécurité avancés

- **Analyse de cycle de vie quantitatif.** Évaluation dès la conception des impacts environnementaux des matériaux et dispositifs développés.
- **Barrières multiples contre les risques.** Encapsulation, monitoring en temps réel, plans de démantèlement et recyclage quantique.

10 Chronogramme et gestion des risques

Le déroulement du projet sur trois ans est détaillé dans le Table 1.

TABLE 1 – *Chronogramme détaillé du projet de thèse (36 mois).*

Période	Objectifs scientifiques	Livrables et critères de succès
M1-M12	Développement du noyau PT-HOPS avec LTC ;	• Code validé sur dimère FMO (précision >98 %)
	Validation sur systèmes modèles.	• Publication sur la méthode
		• Benchmark contre HEOM/QuTiP
M13-M24	Extension MesoHOPS pour multi-excitations ;	• Simulation N=100 chromophores
	Intégration du désordre et de la température ;	• Modèles température-dépendants validés
	Premiers designs OPV éco-compatibles via AI-QD	• 2 candidats OPV avec PCE_pred >18 % et toxicité réduite
M25-M36	Simulation de systèmes agrivoltaïques complets ;	• Modèle symbiotique validé
	Validation expérimentale du modèle symbiotique ;	• Corrélation théorie-expérience démontrée
	Préparation du transfert technologique.	• Business plan de la spin-off finalisé

10.1 Jalons critiques et gestion des risques

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.

Stratégie de gestion des risques

- **Coût AIMD élevé.** Recours à MD classique polarisable + corrections QM ciblées.
- **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 (Institut International d'Agriculture Tropicale) pour données locales maïs/sorgho).

11 Impact attendu et perspectives transformatives

11.1 Impact scientifique et méthodologique

Avancées théoriques majeures

- **Dynamique quantique non-Markovienne réaliste.** Premier cadre intégrant AIMD + Process Tensor-HOPS pour capturer fidèlement les effets d’environnement dans les systèmes photosynthétiques et OPV.
- **Formalisme du bain photonique filtré.** Première modélisation quantique rigoureuse du couplage culture-panneau comme système quantique ouvert à deux bains.
- **Méthodes hybrides IA-physique quantique.** Intégration novatrice de PINNs garantissant des prédictions ML respectant les lois de conservation quantique.

11.2 Impact technologique et économique

Innovation matériaux et dispositifs

- **Matériaux OPV 4ème génération.** Conception rationnelle de matériaux biocompatibles atteignant PCE >18 % avec empreinte environnementale réduite de 60 %.
- **Panneaux agrivoltaïques optimisés.** Développement de filtres spectraux adaptés préservant >85 % de l’activité photosynthétique.
- **Outils prédictifs industriels.** Pipeline ML opérationnel pour criblage rapide (<24 h) de candidats moléculaires.

11.3 Contribution quantitative aux ODD

Métriques d’impact mesurables

- **ODD 7.** Amélioration efficacité : 10–15 % vs matériaux standards → +12 GW h annuels par km² installé.
- **ODD 2.** Préservation productivité : ETR >80 % → maintien 85–95 % rendement agricole.
- **ODD 3.** Matériaux non toxiques : Élimination Pb, Cd → réduction risques 90 %.
- **ODD 15.** Biodégradabilité : Composants organiques dégradables en <10 ans.

11.4 Perspectives à long terme (2030-2040)

Extensions de recherche

- **Photosynthèse artificielle.** Application principes EET optimisé à dispositifs biomimétiques pour production H₂, CO₂ capture.
- **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.

Conclusion

Ce projet de thèse établit un nouveau paradigme pour l'ingénierie quantique des systèmes agrivoltaïques symbiotiques, combinant rigueur théorique, innovation méthodologique et impact sociétal mesurable. L'approche intégrée proposée permet de dépasser les limitations des modèles classiques en capturant la richesse des effets quantiques cohérents dans les transferts d'énergie multi-échelles. Le cadre méthodologique robuste, couplé à une stratégie de validation expérimentale rigoureuse et une gouvernance éthique proactive, positionne ce travail comme une contribution transformative aux défis interdépendants de la transition énergétique et de la sécurité alimentaire durable.

A Benchmarks : Méthodes quantiques comparées

TABLE 2 — Comparaison des performances des méthodes de simulation quantique.

Méthode	Temps CPU (h)	Mémoire (GB)	Précision (%)	Échelle (chromophores)
adHOPS classique	2.1	8.7	98.2	N <100
HEOM standard	5.3	15.2	99.1	N <50
Process Tensor-HOPS	1.3	5.1	98.8	N <500
Stochastic Bundling	0.8	3.2	95.5	N >1 000

B Architecture détaillée AgroQuantPV Suite

B.1 Modules et APIs

- **QuantumEET API.** Point d'accès pour lancer des simulations de dynamique quantique et récupérer les résultats (trajectoires, observables).
- **AgriSensors API.** Interface pour l'acquisition en temps réel des données des capteurs quantiques.
- **MaterialsAI API.** Point d'accès au pipeline de conception de matériaux assistée par IA.
- **ClimateNexus API.** Interface pour la modélisation intégrée eau-énergie-aliment.

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] Florian Metzler, Jorge I Sandoval, and N. Galvanetto. The emergence of quantum energy science. *Journal of Physics : Energy*, 5(4) :041001, October 2023.
- [4] Jonathan Keeling, E. Miles Stoudenmire, Mari-Carmen Bañuls, and David R. Reichman. Process tensor approaches to non-markovian quantum dynamics, September 2025.
- [5] Sayak Adhikari and Roi Baer. Stochastically bundled dissipators for the quantum master equation. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 21(8) :4142–4150, April 2025.
- [6] Donglu Shi. Three-dimensional solar harvesting with transparent spectral selective photovoltaics in agrivoltaics. *Energies*, 18(7) :1788, April 2025.
- [7] Ziyue Ju, Ruichan Lv, Anees A. Ansari, and Jun Lin. Recent advances in additive manufacturing for solar cell based on organic/inorganic hybrid materials. *InfoMat*, 7(7), April 2025.
- [8] Achim Basermann, Michael Epping, Benedikt Fauseweh, Michael Felderer, Elisabeth Lobe, Melven Röhrig-Zöllner, Gary Schmiedinghoff, Peter K. Schuhmacher, Yoshinta Setyawati, and Alexander Weinert. Quantum software ecosystem design. pages 143–188, 2024.