

# Nouveaux enjeux pour les méthodes numériques

## RÉSUMÉ

La physique numérique, troisième pilier et lien essentiel entre la physique théorique analytique et les expériences, englobe à CNRS Physique de multiples domaines scientifiques, allant de la résolution de modèles quantiques pour les problèmes à  $N$ -corps à la science des matériaux, de la matière molle à la physique des plasmas et des hautes énergies. Le rôle des simulations numériques y est de plus en plus vaste, et a été récemment accentué par l'émergence du **calcul quantique** et de **l'intelligence artificielle/apprentissage** automatique (IA/ML). Au-delà des effets de mode, les avancées permises par l'IA/ML justifient d'explorer leurs potentialités et de familiariser les chercheurs avec celles-ci pour en tirer pleinement parti. Il est également important de reconnaître que le ML est avant tout un outil et de sensibiliser aux limites, aux dangers et aux défis associés, tels que la fiabilité des résultats, la durabilité des outils, la pré-évaluation des investissements nécessaires et la concurrence avec le secteur privé. De même, il est essentiel de rester réaliste quant aux promesses du calcul quantique, tout en reconnaissant la dimension exploratoire et fascinante de la recherche dans ce domaine. Certaines problématiques communes à toutes la physique peuvent apparaître plus aiguës pour la physique numérique : en particulier, son **impact environnemental** demande une utilisation responsable, et le manque de diversité y est peut-être encore plus frappant que dans d'autres secteurs de la physique. De plus, la formation en matière de numérique nécessite souvent d'être reprise et remise à jour après les études supérieures. Cependant, ce champ fait preuve d'une dynamique remarquable, et d'ici à 2030, nous verrons l'exploration de territoires encore mal arpentés par ces méthodes, tels que les phénomènes quantiques émergents, les matériaux en conditions extrêmes, les systèmes biologiques, la modélisation multi-échelle des systèmes complexes, la fusion inertielle, les caractéristiques de l'Univers primordial, et maintes autres directions dont nous ignorons à ce jour peut-être même l'existence.

# Nouveaux enjeux pour les méthodes numériques

## LA PHYSIQUE NUMÉRIQUE, UN PILIER EN FORTE ÉVOLUTION

Les calculs accompagnent la recherche en physique depuis longtemps, et la calculatrice, puis les ordinateurs de bureau sont devenus des outils de travail pour la majorité des physiciennes et physiciens. Progressivement, le développement incomparable des machines de calcul a ouvert de nouvelles possibilités et donné naissance à un troisième pilier de la recherche, entre théorie analytique et physique expérimentale, distinct des deux, mais proposant un lien. Comme souvent, l'outil nouveau répond à des besoins et stimule des idées nouvelles. La multitude des recherches en physique numérique va bien au-delà d'une simple numérisation des études analytiques. On assiste à une révolution continue à plusieurs niveaux : révolutions de précision avec laquelle on peut décrire la nature, de rapidité avec laquelle on peut obtenir des réponses, de complexité qui nous rapproche de plus en plus des systèmes en situation réelle, même *operando* (cas des jumeaux numériques), d'exploration de mondes inconnus, que ce soit des matériaux en conditions extrêmes, du monde quantique ou des comportements collectifs qui ouvrent des horizons qualitativement nouveaux. Ces révolutions multiples sont soutenues par le développement du matériel (supercalculateurs parallèles, processeurs graphiques), mais aussi par des approches théoriques nouvelles, d'algorithmes intelligents, de codes partagés. Elles nourrissent d'autres champs de recherche et créent de nouveaux besoins de collaborations, donnant ainsi une importance croissante aux interfaces entre la physique et les mathématiques, la chimie, la biologie ou l'informatique. Loin de voir sa dynamique ralentir, le domaine de la physique numérique a été régulièrement revivifié, par les calculs massifs haut débit, haute performance et le traitement de données à grande échelle dans un passé récent, par les nouvelles révolutions de l'intelligence artificielle (IA) et de l'apprentissage statistique (*machine learning*, ML) ainsi désormais que du calcul quantique. Sans pouvoir prédire en détail ce qui en sortira, le foisonnement des idées est évident, et parmi les différents chemins explorés avec enthousiasme par les scientifiques, certains nous porteront très loin.

La physique numérique est présente dans toutes les sections du comité national de la recherche scientifique rattachées à CNRS Physique, résultant en une grande diversité de méthodes et d'enjeux associés.

## CHAMPS DISCIPLINAIRES

### PHYSIQUE ATOMIQUE, SIMULATIONS QUANTIQUES

**Simulations quantiques.** Le domaine des simulations par des plateformes quantiques bénéficie d'un engouement international exceptionnel, destiné à s'accroître à l'horizon 2030. La France est relativement bien positionnée au niveau matériel, avec plusieurs plateformes de pointe opérées par des acteurs académiques et privés. Elle accuse certainement un retard au niveau logiciel, non au niveau de l'informatique quantique théorique, mais plutôt des simulations classiques de (ou sur) les plateformes NISQ (*noisy intermediate scale quantum*). Avec le nombre encore incertain de qubits et l'avancée des méthodes classiques (notamment en ML), il n'est pas clair que la suprématie quantique, à savoir des résultats obtenus sur une plateforme quantique non atteignables par une simulation classique, soit effective en 2030. Il est probable que la suprématie et le passage à l'échelle surgiront en premier par des calculs quantiques hybrides, mélangeant des méthodes classiques (méthodes expertes comme les réseaux de tenseurs, méthodes d'*embedding* ou bien ML pour optimiser les portes quantiques) et l'utilisation du processeur quantique réduite à la tâche où il est le plus efficace (par exemple, trouver l'état fondamental d'un problème réduit). L'objectif qui semble atteignable le premier est la simulation quantique de la dynamique de systèmes quantiques fortement hors équilibre, sur des temps plus longs que ceux accessibles aux simulations classiques.

De nombreux sous-produits sont à attendre d'études numériques approfondies sur le sujet : le perfectionnement des ordinateurs quantiques et de leur protocole d'utilisation, des méthodes classiques expertes poussées dans leurs retranchements, une meilleure compréhension de la physique riche de ces plateformes (équations maîtresses hors équilibre, transition vers le chaos), les algorithmes dé-quantifiés, prévus initialement pour les simulateurs quantiques, mais utiles aussi pour des problèmes classiques, etc. Il existe un grand travail de création d'algorithmes hybrides à effectuer, plateforme par plateforme, pour exploiter au mieux l'intrication dans ces simulateurs.

**Systèmes quantiques hors équilibre.** À la frontière entre physique atomique, photonique, matière condensée, phy-

sique statistique et mathématique, l'étude des systèmes quantiques fortement hors équilibre est un domaine avec un fort couplage entre expériences (plateformes de simulations quantiques, expériences pompe-sonde), théorie et numérique. Pour les simulations, le problème du passage à l'échelle (plus grands systèmes quantiques, temps plus longs) est conséquent et il est probable qu'il ne soit résolu qu'en cultivant un bouquet de méthodes. Un défi particulier est la résolution efficace de l'équation de Schrödinger stochastique obtenue par déroulement d'une équation maîtresse décrivant les systèmes à  $N$ -corps quantiques couplés avec un environnement (systèmes dissipatifs, mesure quantique). Les méthodes de réseaux de tenseurs doivent être améliorées pour franchir la barrière d'intrication qui les limite aux temps courts. Pour tous ces défis, le rapprochement entre méthodes (par exemple, réseaux de tenseurs et neuronaux, méthodes hydrodynamiques) ou la création d'autres classes de fonctions variationnelles adaptées sont à explorer.

## PHYSIQUE DE LA MATIÈRE

Depuis les questions fondamentales jusqu'aux applications les plus poussées, les travaux en physique de la matière présentent un continuum d'approches numériques et de calculs à toutes les échelles.

### Problème à $N$ -corps quantique

Ce terme recouvre les situations dans lesquelles les interactions entre particules quantiques sont dominantes par rapport aux termes cinétiques, conduisant à l'échec des approximations à une particule. Les systèmes concernés sont les matériaux à forte corrélation électronique en matière condensée (supraconducteurs à haute  $T_c$ , isolants de Mott, antiferromagnétiques frustrés, fermions lourds, matériaux moirés, interfaces d'hétérostructures), les gaz atomiques ultra-froids (sur réseau optique ou non), les étoiles à neutrons, les plasmas chauds, etc. La complexité de ces problèmes, même dans des modèles simples, est exponentielle avec le nombre de degrés de liberté et une grande variété d'approches numériques est développée. Des avancées conceptuelles et algorithmiques importantes font espérer qu'à l'horizon 2030, des problèmes fondamentaux tels que le modèle de Hubbard fermionique en 2D seront résolus ou du moins bien compris. Y contribuera le progrès dans les méthodes comme par exemple la DMRG (groupe de renormalisation de la matrice densité) en  $d > 1$  et à température finie, le champ moyen dynamique (DMFT) en *clusters*, le Monte-Carlo quantique (QMC), et surtout la combinaison de différentes méthodes. La convergence entre méthodes d'*embedding* en chimie quantique et des approches issues de la physique (DMFT) ainsi que la combinaison avec des calculs *ab initio* en DFT ou en théorie des perturbations à plusieurs corps (MBPT) permettront une description réaliste des matériaux. Pour ceci, il faudra développer des *solvers* plus puissants pour résoudre les situations physiques complexes (multi-orbitales, basse température, hors équilibre, etc.).

La France est à la pointe dans certains domaines (QMC diagrammatique par ex.), mais en retard dans d'autres (comme le ML pour la matière quantique corrélée), et reste globalement sous-représentée dans les approches numériques des corrélations fortes et ses grands codes libres. La dynamique récente de recrutements est toutefois positive. Un domaine où la France est trop peu représentée est celui des méthodes par réseaux de tenseurs basées sur la compression des fonctions d'onde (états produits de matrices, DMRG, etc.) qui sont polyvalentes (en température, systèmes à et hors équilibre, systèmes fermés ou couplés à un environnement), en forte croissance hors de nos frontières, et particulièrement adaptées à la simulation des plateformes de calcul quantique. Ces méthodes de compression des fonctions quantiques (discrètes) pourront être adaptées pour les fonctions continues présentant peu de corrélations entre différentes échelles, promettant un impact important pour la résolution d'EDP en dynamique des fluides, astrophysique, en ML, etc.

### Développement des approches *ab initio*

Les approches *ab initio* permettent d'étudier les matériaux réels sans ajuster de paramètres sur des expériences. Les méthodes basées sur la fonction d'onde telles que le QMC offrent une grande précision pour l'énergétique, permettant notamment de prédire les diagrammes de phase de matériaux simples. Les approches basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) nécessitent une approximation, mais peuvent décrire l'état fondamental et les états excités (TDDFT) de matériaux plus complexes. Les approches basées sur les fonctions de Green utilisent souvent des approximations perturbatives (comme GW) et sont principalement utilisées pour calculer des spectres. De nombreux défis doivent encore être relevés dans ce domaine. D'une part, il est nécessaire **d'augmenter la précision et la fiabilité des calculs** afin de suivre l'amélioration de la précision expérimentale, et de garantir leur qualité avant d'intégrer les résultats dans les bases de données. Ceci implique de réaliser une comparaison systématique des approches, des codes, des fonctionnelles, ainsi que de mettre en place des estimateurs d'erreurs et des *workflows* robustes. Cette évolution requiert à son tour une mobilisation collective qui devra être soutenue. Il est également important de **développer de nouvelles fonctionnelles de la densité et des fonctions de Green**, ainsi que les algorithmes correspondants, afin d'élargir la gamme des matériaux accessibles et des propriétés (en particulier liées aux états excités ou hors équilibre). Les pistes prometteuses incluent l'hybridation avec d'autres approches telles que le QMC et le ML. **L'étude *ab initio* des couplages entre excitations élémentaires**, tels que électron-phonon, magnon-phonon, ou exciton-photon, revêt une grande importance pour des applications telles que le photovoltaïque, la spintronique, la supraconductivité, le calcul quantique ou la chimie dans les cavités optiques. Des développements sont également nécessaires pour accompagner **les nouvelles expériences de spectroscopie** résonnante, non linéaire, cohérente ou résolue en temps, et pour **prendre**

en compte des conditions expérimentales telles que la température. Par ailleurs, les développements visant les propriétés dépendant du moment angulaire orbital ou du spin et de leur couplage permettront par exemple l'étude des textures et de la dynamique de spin, les transitions de phase magnétiques induites par un laser, ou la description de couches magnétiques 2D, et présentent des enjeux importants en spintronique (et plus récemment en orbitronique). Enfin, le traitement quantique des noyaux légers est un domaine en plein développement, notamment pour décrire les matériaux en conditions extrêmes ou les supraconducteurs à base d'hydrures. Des progrès prometteurs sont observés dans des approches telles que les bains quantiques à bruits colorés, la dynamique moléculaire (MD) par intégrales de chemins, la dynamique de Bohm, le couplage électron-ion en QMC et la factorisation exacte.

### Matière molle, physique statistique, matière complexe

La mécanique statistique est traditionnellement un domaine propice à l'utilisation de l'approche numérique. L'algorithme Monte-Carlo (MC) Metropolis a été historiquement introduit pour étudier l'équation d'état des systèmes de disques durs en s'appuyant sur les ensembles de Gibbs, la MD pour comprendre la dynamique des particules classiques en interaction. L'objectif général du domaine est de prédire les propriétés émergentes d'un grand nombre d'agents en interaction.

En physique des verres, des progrès significatifs ont été réalisés par exemple grâce à l'introduction d'algorithmes MC intelligents permettant l'exploration numérique d'états d'équilibre difficiles à atteindre, même dans un cadre expérimental. Cependant, une exploration complète de la dynamique de ces systèmes reste encore hors de portée. Ce problème ne peut pas simplement être résolu en augmentant la puissance de calcul et nécessite le développement de nouveaux algorithmes de simulation dynamique. L'utilisation de mouvements informés par l'IA/ML avec des pas de temps plus longs ou la mise en œuvre d'EDP stochastiques de champ (par ex. Dean-Kawasaki) sont des pistes prometteuses. Ces innovations seront essentielles pour mieux comprendre les comportements dynamiques de systèmes complexes bien au-delà des verres.

La mécanique statistique hors équilibre est centrale en biologie, en matière molle et pour les systèmes complexes en général. L'absence de modèles théoriques complètement maîtrisés souligne l'importance cruciale des simulations numériques. Par ex., l'étude de la matière active a permis de mieux comprendre l'organisation émergente des agents biologiquement actifs et d'explorer les propriétés clés des systèmes hors équilibre. En l'absence de connaissances *a priori*, le traitement automatisé des données massives expérimentales permet d'extraire des informations substantielles. Ici, l'application de techniques d'IA/ML pour l'apprentissage par équation est prometteuse pour découvrir des lois physiques grâce aux notions

de conservation et de symétrie. Les simulations seront cruciales aussi pour comprendre et maîtriser les matériaux actifs aux propriétés fascinantes telles que l'auto-assemblage, l'auto-réparation et les effets topologiques.

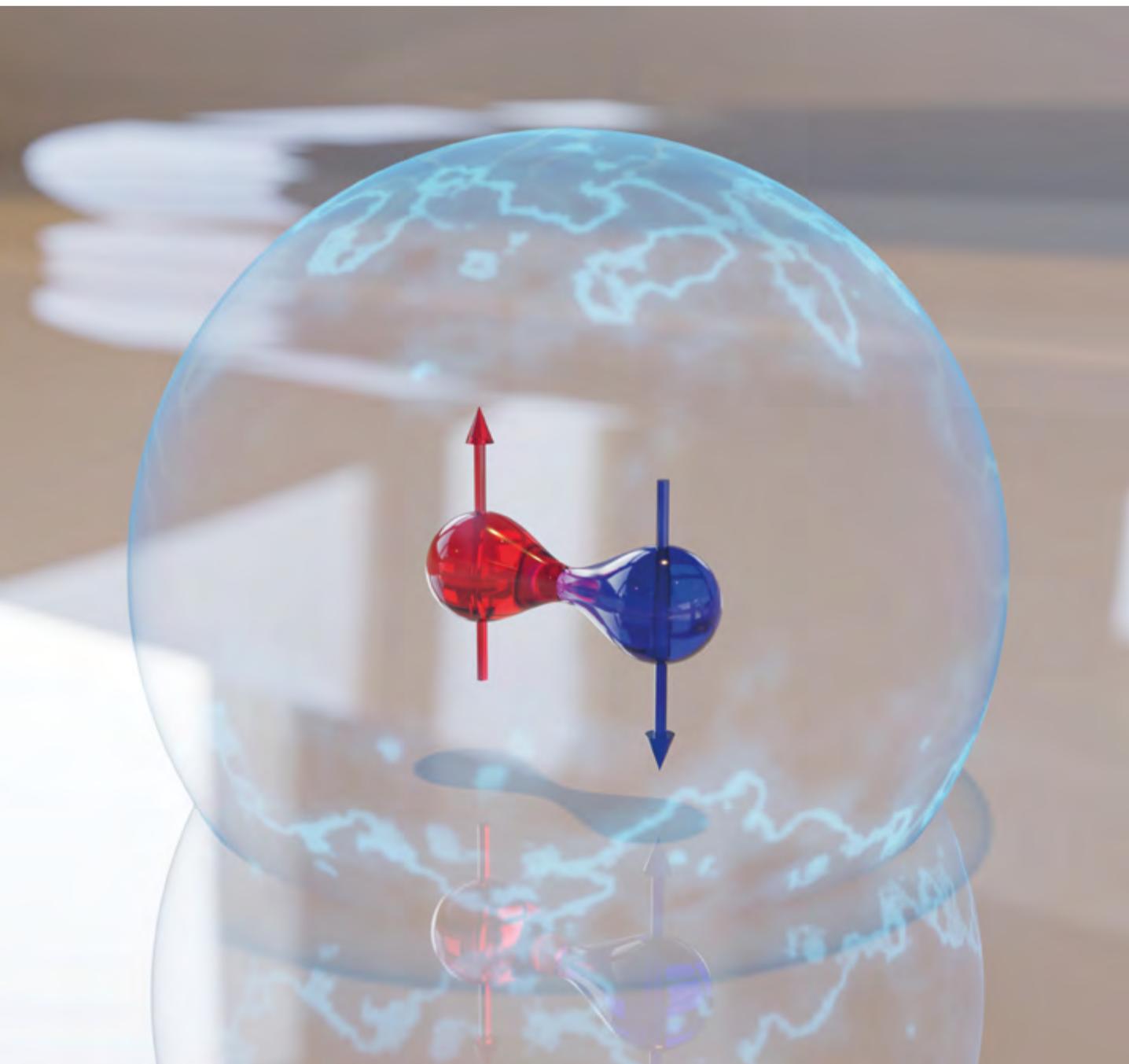
La matière molle est un domaine mature où théorie, simulations et expériences sont depuis longtemps connectées. À l'avenir, ces interactions doivent être renforcées par l'émergence de modèles plus avancés permettant de dépasser les simplifications présentes dans les modèles historiques. Plus spécifiquement, les techniques de modélisation devront être améliorées par une prise en compte plus réaliste de la friction entre particules et des interactions électrostatiques au-delà du niveau linéaire, ainsi que l'étude des interactions hydrodynamiques ou d'événements rares comme la nucléation.

Les physiciens et physiciennes étant volontiers sceptiques envers l'utilisation de boîtes noires, l'accueil initial de l'IA/ML était teinté d'un certain niveau de défiance, mais celui-ci s'est considérablement atténué ces derniers temps. Une des raisons provient des efforts fournis pour formaliser les problèmes d'IA à l'aide de la mécanique statistique. Ainsi, le modèle de Hopfield, l'un des premiers modèles de réseaux neuronaux, est une variante de celui d'Ising. La communauté de physique statistique devra continuer à apporter son point de vue unique sur le ML et contribuer à la fertilisation croisée entre ces deux domaines.

### Science des matériaux

Sous l'impulsion notamment des enjeux climatiques, la recherche de nouveaux matériaux performants et respectueux de l'environnement s'appuie sur le calcul numérique, qui fournit des informations et des prédictions inaccessibles à l'expérimentation. Cependant, la science computationnelle des matériaux (CMS) doit être perçue comme une partie intégrante de la recherche fondamentale. Plusieurs directions prometteuses se dégagent en CMS, portées par les avancées méthodologiques en physique statistique et *ab initio* ainsi que par des approches spécifiques aux phénomènes étudiés, et ce domaine mérite d'être développé.

Les matériaux complexes, comme les hétérostructures, les matériaux multiphasés ou les empilements de matériaux bidimensionnels, nécessitent une modélisation précise et réaliste (défauts, interfaces et désordre) afin d'exploiter leurs propriétés prometteuses. À l'avenir, le potentiel des calculs *brute force* sur de grands systèmes permettra d'étudier par ex. de nouveaux mécanismes de recombinaison de dislocations, de formation de domaines structuraux ou magnétiques ou encore la propagation d'excitations spécifiques. En parallèle, la simplification des calculs (par ex., avec des bases localisées, liaisons fortes basées sur la DFT, etc.) et les nouveaux algorithmes pour les méthodes *ab initio* DFT et MBPT (par ex. stochastiques) permettront une description plus réaliste des effets dus à l'interaction coulombienne et à la complexité structurale.



Qubit réalisé à l'aide d'un logiciel 3D. © Sylvain BERTAINA / IM2NP / LASIRE / FSU / CNRS Images

**La modélisation des matériaux *operando***, qui tient compte des conditions expérimentales (environnement, température, pression) ou des transformations en cours d'utilisation (par ex. lors des transitions stockage/déstockage dans les batteries), est en plein essor. Les défis incluent la description de transitions à différentes échelles et des phénomènes hors équilibre. En particulier, l'échantillonnage efficace du paysage de configurations complexe pour le calcul de l'énergie libre nécessite le développement de méthodes avancées de physique statistique couplées à l'IA/ML.

Les méthodes de **machine learning** promettent de nombreuses avancées. Par exemple, en métadynamique, elles peuvent permettre la détermination automatique de

variables collectives à l'aide de modèles basés sur les auto-encodeurs ou les machines à vecteurs de support. En MD *ab initio*, elles permettent d'accélérer les simulations en évaluant les forces atomiques à partir d'un potentiel ML ré-ajusté en temps réel sur une base de données DFT (*active learning*). Des simulations de plusieurs dizaines de milliers d'atomes deviennent envisageables avec une précision *ab initio*. Enfin, la conception inverse (*inverse design*) utilise des outils comme les réseaux neuronaux en graphes équivariants (EGNN) pour proposer de nouveaux matériaux en ciblant spécifiquement des propriétés particulières, s'affranchissant de l'approche traditionnelle par essai-erreur.

**Le déploiement et l'utilisation à grande échelle de bases**

de données regroupant des données structurales et fonctionnelles des matériaux sont indispensables pour éviter la duplication des travaux, l'apprentissage et l'étude de matériaux plus complexes. Ces données, issues d'expériences et de modélisations et qui seront complétées à terme par des trajectoires de MD ou des spectres, doivent être dans un format normalisé et facilement accessibles. Le projet PEPR DIADEM vise à combler le retard de la France par rapport à des initiatives comme Materials Genome, NOMAD, OPTIMADE ou Materials Cloud, mais plusieurs points importants liés au *big data* restent ouverts.

## INTERACTION LUMIÈRE INTENSE ET PLASMA

Les progrès récents des technologies laser permettent l'étude de mécanismes fondamentaux et d'applications jusque-là inexplorés, en reproduisant des conditions extrêmes de l'Univers. Les simulations sont indispensables pour comprendre ces nouveaux effets et pour préparer et interpréter les expériences, rendues difficiles par les très courtes échelles de temps et d'espace en jeu.

Les codes *particle-in-cell* (PIC) sont au cœur de la simulation des **accélérateurs plasma**. Ici, un premier défi est de reproduire fidèlement les résultats expérimentaux. Un autre est d'avoir un temps de restitution quasi immédiat pour aider au pilotage *operando* comme dans les accélérateurs conventionnels. Ces simulations sont très coûteuses : il faut développer des stratégies numériques et des modèles réduits pour optimiser le rapport qualité/coût. Pour les méthodes PIC, les pistes sont l'utilisation du *boosted frame*, le raffinement de maillage, le modèle d'enveloppe, la décomposition en modes azimutaux, la *merge* de particules, la réduction de domaine, les codes quasi-statiques, etc. Ces codes étant utilisés par d'autres communautés (plasmas spatiaux et astrophysiques), une collaboration large au-delà de CNRS Physique est souhaitable pour ces développements.

Les outils de simulation devront bénéficier d'apport théorique pour la conception de nouveaux modèles réduits ainsi que pour l'inclusion d'effets physiques issus de l'électrodynamique quantique (QED) ou de la physique nucléaire. Le ML peut être utilisé pour permettre l'économie de simulations, le post-traitement de grands jeux de données dont l'acquisition pourrait aussi être optimisée et enfin pour concevoir voire piloter un accélérateur plasma.

Les lasers ultra-haute intensité permettent désormais d'explorer des régimes et effets d'**électrodynamique quantique** en champ fort (SFQED) comme l'émission de photons gamma de très haute énergie, la diffusion Thomson non-linéaire ou la production de paires électrons/positrons, notamment grâce à la potentielle interaction des champs lasers intenses avec un plasma. De même, les **lasers à électrons libres** (FEL) ouvrent des enjeux fondamentaux (physique des plasmas, matière) et applicatifs (médicaux) importants dans un avenir proche. Un défi

numérique est adossé à ces thématiques, qui nécessite la présence de numériciennes et numériciens laser-plasma et particulièrement d'experts et expertes aux interfaces simulation hautes performances.

Les résultats encourageants obtenus sur l'installation NIF aux USA à l'aide de lasers multi-kJ ouvrent enfin de nouvelles **perspectives énergétiques pour la fusion inertielle**. En France, le CEA/DAM dispose de codes hydrodynamiques nécessaires à la conception de futures expériences qui seraient aussi utiles à d'autres communautés qui étudient des cibles plasmas, et dont pourraient bénéficier les autres chercheurs.

## HAUTES ÉNERGIES

Les activités en physique des **astroparticules** s'appuient sur des données issues d'observations de l'Univers. Les simulations sont cruciales pour accroître le volume de données nécessaire à l'entraînement robuste de l'IA employée pour reconnaître les événements. Les codes de dynamique de champs dans un contexte cosmologique sont à l'**interface entre physique des particules et cosmologie**, dans le cadre d'une théorie de champ moyen avec couplage aux fluctuations de la métrique et tenant compte des effets de rétroaction. Les calculs théoriques au-delà du régime linéaire sont attendus pour comprendre la **physique des grandes structures de l'Univers**, observées par LSST et Euclid. On anticipe des résultats expérimentaux très précis alors que les simulations à *N*-corps sont problématiques : coûteuses (notamment à cause du nombre de valeurs des paramètres d'entrée), encodage ambigu des effets non-linéaires entre diverses simulations, effets importants de discrétisation pour la simulation de systèmes massifs comparés à ceux de la matière noire. Pour toutes ces études, la communauté de physique des particules est bien structurée, mais des efforts sont nécessaires à l'interface avec la cosmologie, notamment en ce qui concerne l'extraction et l'interprétation des données.

Les activités en physique de la **gravitation** portent sur la relativité numérique et la résolution de l'équation d'Einstein pour divers systèmes physiques, par exemple le problème à deux corps en interaction gravitationnelle appliqué à la fusion de deux trous noirs, y compris dans le contexte des théories de la gravité modifiée. Les étoiles à neutrons et les supernovae sont étudiées en hydrodynamique relativiste. La **détection des ondes gravitationnelles** (OG) issues de ces corps et leur **modélisation** contraignent le diagramme de phase de la QCD, nécessitant toutefois des données fiables sur les taux de réaction nucléaires. Les défis numériques proviennent du caractère non linéaire de l'équation d'Einstein pour laquelle il existe des solutions avec des modes instables ou ne vérifiant pas les contraintes de jauge. Les problèmes avec une source non compacte sont encore complexes à résoudre. Grâce à son expertise des méthodes spectrales, la communauté va fortement s'investir dans l'analyse et l'interprétation des données d'OG recueillies par Virgo et

le projet Einstein Telescope, convoluant l'analyse avec les données existantes en nombre plus modeste. L'IA sera un outil précieux à condition de disposer de suffisamment de trames d'OG pour l'entraînement. L'espace des paramètres (masse, spin, taux de réactions nucléaires) étant vaste, le défi sera d'optimiser ce nouveau type de simulation par des efforts sur le parallélisme et les algorithmes.

Les activités en **physique des collisionneurs** seront guidées par les expériences présentes en 2030, avec des objectifs allant de la recherche directe de nouvelle physique à l'établissement des contraintes de la physique des particules sur l'Univers primordial et son évolution. Les efforts à venir porteront sur **le calcul d'intégrales multiples pour les corrections quantiques à deux boucles**, en tenant compte des masses finies des particules virtuelles. Ici l'IA pourra guider la paramétrisation analytique de ces intégrales. Un autre défi dans les approches perturbatives provient d'instabilités numériques se traduisant par des sections efficaces négatives. L'enjeu des simulations Monte-Carlo sera **la prise en compte de processus plus complexes**: davantage de particules dans l'état final, imbrication entre corrections électrofaibles à des processus forts et corrections fortes à des processus électrofaibles dans le cas de diagrammes à l'arbre, divergences issues de corrections électrofaibles en SMEFT (*standard model effective field theory*). En physique des ions lourds, les futures simulations auront pour ambition **l'examen des corrélations entre observables**, impliquant la montée en gamme des analyses de données. Enfin la résolution des EDP dans le régime non linéaire, qui gouvernent la dynamique des modèles bi-dimensionnels de QCD dans son régime de saturation, sera là aussi un défi numérique majeur.

Les activités en **théorie quantique des champs** concernent les simulations *ab initio* de la physique nucléaire et, en physique des particules, l'étude de l'interaction forte dans son régime non-perturbatif. Les équipes de QCD sur réseau cherchent à réduire l'incertitude théorique sur les éléments de matrice hadroniques qui paramètrent des processus intéressants en phénoménologie, notamment en physique du méson B ou du muon. Un effort portera sur **la tomographie 3D du hadron**, impliquant la résolution d'un problème inverse. La fonction spectrale est clef dans l'étude **des processus inclusifs**: il faut alors considérer dans les simulations la limite de volume infini avant la limite du continu. **Les systèmes physiques à potentiel chimique non nul** souffrent d'un problème de signe sévère, et des alternatives aux simulations Monte-Carlo devront être explorées (par ex. réseaux de tenseurs ou calcul quantique). Enfin l'IA générative sera utile pour l'échantillonnage Monte-Carlo de théories des champs conformes ou de modèles de matière noire composites.

## THÉMATIQUES SCIENTIFIQUES COMMUNES À PLUSIEURS CHAMPS DISCIPLINAIRES

Certaines avancées méthodologiques transcendent le découpage de la physique par domaines et les disciplines scientifiques en général.

**La modélisation multi-échelle (ME)** a été unanimement identifiée comme un défi où le ML peut être disruptif, après de nombreuses années de stagnation. Il est désormais envisageable d'intégrer de manière dynamique différents niveaux de modélisation à différentes échelles de temps et d'espace. Dans le domaine temporel, différentes hiérarchies de l'équation de Langevin généralisée sont explorées pour obtenir une granularité plus grossière, mais cela reste à améliorer. En matière condensée, les processus atomistiques et mésoscopiques pourraient être traités dans un même modèle grâce à une adaptation en temps réel de l'échelle. En physique des plasmas, des couplages entre descriptions fluide pour les grandes échelles et cinétique pour les petites permettront l'étude par ex. des interactions Soleil-Terre. Les simulations en astroparticules, couplant les champs de particules aux fluctuations de la métrique, doivent prendre en compte des phénomènes aux petites et grandes échelles. En matière molle ou biologique, les succès jusque-là limités de l'approche ME pourront être amplifiés par le ML, avec par exemple une application potentielle pour les systèmes biomoléculaires complexes permettant l'intégration de descriptions atomistiques détaillées avec des effets macroscopiques comme le comportement de phase. En mécanique des matériaux, les méthodes couramment utilisées au niveau mésoscopique permettent déjà de prédire les évolutions microstructurales dans des systèmes complexes (champs de phase) ou la déformation plastique des matériaux cristallins en étudiant l'évolution d'un ensemble de dislocations dans le temps (*discrete dislocation dynamics* ou DDD). Un couplage efficace entre les différentes approches (atomistique, champs de phase, DDD) à différentes échelles permettrait de décrire des phénomènes complexes tels que la propagation ductile des fissures, y compris la génération et la recombinaison de dislocations à la pointe de la fissure, ainsi que les phénomènes de fatigue. Tous ces exemples montrent l'intérêt d'une approche intégrative et structurée sur les approches ME.

**Analyses des données en temps réel**: la croissance du volume de données générées par les simulations et les expériences, dans des délais de plus en plus restreints, est devenue récemment exponentielle, eu égard notamment aux mises à niveau de certains grands équipements tels que l'ESRF. La gestion efficace de ces données représente un défi majeur, particulièrement en conditions operando. Elle nécessite le développement d'outils d'analyse en temps réel permettant de sélectionner des données, guider les expériences, et détecter des phénomènes intéressants. Par ailleurs, les questions du stockage et du partage de ce volume extrême de données deviennent critiques dans plusieurs domaines.

**Interdisciplinarité**: les avancées en physique numérique auront des répercussions dans de nombreux domaines au-delà du périmètre de la physique: chimie, biologie, géologie, ingénierie, etc. La capacité d'étudier des millions d'atomes avec une précision suffisante permettra des avancées sur les batteries, la photosynthèse, le

photovoltaïque, la dénaturation de l'ADN par les UV, les poussières interstellaires, pour ne citer que quelques exemples. En retour, les méthodes utilisées par les numériciennes et numériciens de CNRS Physique bénéficient des progrès effectués en chimie quantique ou en physique nucléaire. Deux interfaces sont particulièrement cruciales pour les développements :

— **L'interface avec les mathématiques appliquées** est très bénéfique, mais reste à développer dans de nombreux domaines de la physique numérique. Plusieurs progrès algorithmiques rendus possibles par des développements mathématiques sont à prévoir, au-delà du ML. Un exemple est d'exploiter la structure des problèmes ou des données pour compresser ou exploiter l'information physique, comme la décomposition interpolative pour compresser les fonctions de Green ou l'acquisition comprimée pour la tomographie. Un autre impact important à venir provient des méthodes permettant une estimation systématique et rigoureuse des erreurs issues de différentes sources, notamment pour mieux certifier les données avec application dans les bases de données utilisées en IA. Ceci permettra de rendre les calculs plus prédictifs et moins coûteux. Une autre convergence est celle du développement de nouvelles approches stochastiques et d'inférence bayésienne pour améliorer l'échantillonnage statistique, simuler des événements rares et accélérer les méthodes numériques (MC, MD). De manière générale, la communauté française est bien armée grâce à la présence d'expertes et experts en différents champs des mathématiques appliquées, statistique/probabilités, etc., mais l'interface avec la physique numérique manque de structuration ;

— **Interface avec l'informatique.** L'informatique est le socle de la physique numérique et un dialogue permanent entre ces deux disciplines est naturel. Les nouveaux modèles de programmation tels que Kokkos pourraient résoudre bon nombre de problématiques de portabilité. Des techniques de génie logiciel et des méthodes formelles peuvent aider à optimiser, maintenir et valider les codes dépassant une taille critique et devenus difficilement gérables par de la simple expertise métier à caractère local. Une autre thématique active à cette interface est l'informatique quantique, où les paradigmes de programmation sont revisités pour exploiter les propriétés de la mécanique quantique, mais aussi tenir compte des contraintes imposées par les implémentations physiques des calculateurs quantiques (notamment NISQ). Un des enjeux à venir pour cette communauté déjà structurée est la création d'algorithmes hybrides. Enfin, le thème majeur de l'utilisation de l'IA/ML en physique numérique s'inscrit naturellement dans cette interface et est discuté ci-après.

## THÈMES GÉNÉRAUX

### INTELLIGENCE ARTIFICIELLE ET MACHINE LEARNING

Dans les années à venir, les **techniques d'IA/ML seront largement appliquées en physique, bouleversant notre**

**approche de la physique numérique tant au niveau des méthodes que de leur programmation.** Plus spécifiquement, les techniques de ML deviennent standard dans le traitement de données (en premier les images) simulées ou expérimentales ou la génération et l'optimisation de codes. Les méthodes pertinentes sont celles intégrant des informations physiques (*physically informed ML*), permettant l'interprétabilité, et les méthodes génératives comme les auto-encodeurs variationnels ou les modèles de langage de grande taille (*large langage model*, LLM). Parallèlement, des outils spécifiques d'analyse numérique comme la différentiation automatique et l'arithmétique des intervalles (pour la quantification des incertitudes) gagnent en importance. Par ailleurs, l'optimisation des réseaux neuronaux en explorant le paysage de la fonction de coût est un processus étudié par les méthodes de la physique statistique, et les physiciens et physiciennes peuvent aussi contribuer au développement de nouvelles approches en ML en collaboration avec des spécialistes du domaine.

Les structures nationales ou régionales telles que AISSAI (CNRS), ISDM (Université de Montpellier), SCAI (Sorbonne Université), IRT Saint Exupéry (Toulouse), les Instituts interdisciplinaires d'intelligence artificielle (3IA) et les groupements de recherche tels que IAMAT ainsi que la MITI du CNRS favorisent ce type de collaborations, mais leur visibilité doit être améliorée. **Il reste pour cela des défis à relever**, tels qu'établir un langage commun entre physiciennes et physiciens et spécialistes de l'IA, favoriser la collaboration avec les acteurs privés pour influencer l'utilisation des ressources matérielles et des développements algorithmiques, rapprocher des communautés travaillant sur les approches basées sur les données (par exemple en astrophysique ou en sciences des matériaux) de celles travaillant sur les approches de principe (reformulation des problèmes physiques ou des algorithmes existants comme des problèmes d'optimisation traitables par ML).

Les aspects de **formation en IA/ML** recouvrent plusieurs dimensions. À l'horizon 2030, **il est fondamental que tous les étudiants en sciences bénéficient d'une formation de base en IA/ML**, au-delà d'une simple utilisation de ces outils comme une boîte noire. Par ailleurs, les difficultés rencontrées par certains physiciennes et physiciens expérimentés pour franchir le pas en IA/ML doivent être jugulées. L'échange de connaissances et la collaboration entre seniors et jeunes talents de l'IA en physique doivent se développer.

**Globalement enthousiastes** envers les avancées permises par le ML au-delà des effets de mode, les numériciennes et numériciens souhaitent aussi alerter sur **ses limites, dangers et défis**. La **fiabilité des résultats** est une préoccupation majeure, nécessitant une maîtrise complète du processus d'apprentissage automatique, de la création de la base de données à la validation des résultats. La collaboration avec des mathématiciens et mathématiciennes joue un rôle crucial ici. La **durabilité des outils** est

également une question : étant donnée l'évolution rapide en IA/ML, il est important de garantir la pérennité des outils développés. Il faut aussi trouver un équilibre entre avantages globaux offerts par l'IA/ML et ressources qu'il exige, en comparaison avec les approches conventionnelles. Il est ici crucial de faire prévaloir la bonne pratique de pré-évaluation du **rapport intérêt de l'utilisation du modèle vs investissement requis pour sa construction**. Les recherches sur les approches frugales en ML pour la physique, comme l'apprentissage à partir d'un petit jeu de données ou la généralisation, sont à fortement encourager.

### ASPECTS ENVIRONNEMENTAUX ET SOCIÉTAUX

Les impacts environnementaux du numérique sont multiples, très importants et en croissance très rapide. Pour les gaz à effet de serre, le niveau d'émission du numérique se situait à peu près à hauteur du trafic aérien mondial en 2021 et est en croissance de 6 % par an. Le numérique a d'autres impacts négatifs forts sur l'environnement de par son utilisation de très nombreux métaux. Pour des recommandations concrètes, nous renvoyons au chapitre *Intégrer les enjeux environnementaux à la recherche en physique*.

En physique numérique, les femmes représentent moins de 10 % des effectifs concernés à CNRS Physique. Une hypothèse est que la discipline souffre d'une image dégradée auprès des femmes par effet cumulatif de ce que

véhiculent la physique et l'informatique. Le déséquilibre semble moins fort en physique numérique sur les thèmes appliqués ou émergents comme l'IA. Ces constatations empiriques requièrent une attention particulière, peut-être plus encore que dans d'autres domaines de la physique.

### ENSEIGNEMENT ET FORMATION

La physique numérique est bien consolidée comme troisième pilier (entre physiques théorique et expérimentale) en recherche, mais le constat général est que ce n'est pas le cas au niveau de la formation des physiciens et physiciennes. Ce décalage a été accentué par la révolution récente, insufflée par les méthodes de l'IA/ML, encore peu enseignées. Trois aspects clés ont été identifiés comme essentiels à la formation moderne en physique. **(I) La culture numérique**: concepts fondamentaux de l'informatique tels que systèmes d'exploitation, processeurs, hiérarchie de la mémoire, débogage, profilage, compilation ainsi qu'une connaissance de base des environnements de programmation et systèmes d'exploitation; **(II) en programmation générale**: connaissance pratique de base d'un langage de haut niveau (par ex. Python) et d'un langage de bas niveau (par exemple, C/C++); **(III) en physique numérique**: boîte à outils complète de méthodes numériques et algorithmes essentiels pour tout physicien et physicienne. Ces différents thèmes devront être repris dans le cadre d'écoles ou de formations des chercheurs pour ceux qui ne les ont pas appris durant leurs études.

Connection d'une puce à un cryostat. © Hubert RAGUET / C12 Quantum Electronics / LPENS / CNRS Images

