



## DAVID WAROQUIERS

# Ingénieur civil en chimie et science des matériaux, 2008, UCLouvain, et Docteur en sciences appliquées, 2013, UCLouvain.

# Après sa thèse, David Waroquiers travaille sur divers projets appliqués à la prédiction de propriétés des matériaux dans le cadre de collaborations industrielles au sein de l'IMCN (Institut de la matière condensée et des nanosciences).

# En juin 2020, il quitte l'UCLouvain pour cofonder la start-up Matgenix, accompagné du Pr Gian-Marco Rignanese, du Pr Geoffroy Hautier et du Dr Guido Petretto.

Grâce à son expertise, Matgenix est en mesure de traduire les problèmes des industriels en termes techniques et de leur expliquer ensuite dans quelle direction chercher pour atteindre les résultats escomptés. Une manière de dérisquer le processus pour les industriels.

Science des matériaux

# À TRAVERS LES MYSTÈRES DE LA MATIÈRE

« Dans le futur, nous avons l'ambition de développer un Google des matériaux »

C'est côte à côte que le Pr Gian-Marco Rignanese et le Dr David Waroquiers explorent l'univers des matériaux. Leur quête? Prédire les propriétés physiques inconnues de la matière et découvrir de nouveaux matériaux pour booster l'innovation industrielle. Rencontre avec deux des cofondateurs de la société Matgenix chez A6K-E6K, un lieu dédié aux métiers de l'ingénieur en plein cœur de Charleroi.

Rédaction: Nelson Garcia Sequeira | Photos: Laetizia Bazzoni

**La start-up est créée en juin 2020 avec une ambition: découvrir le comportement et les caractéristiques des matériaux sous toutes leurs variations. Pourquoi est-ce un enjeu clé?**

GIAN-MARCO RIGNANESE ► «La science des matériaux distingue les matériaux utilisés pour leur structure, par exemple pour soutenir ce bâtiment, de ceux dont l'intérêt réside dans des propriétés particulières, comme la couleur, la conductance, la ductilité, etc. C'est ce volet fonctionnel qui nous occupe,

car les matériaux, du fait de ces caractéristiques, offrent une valeur ajoutée et une multitude d'alternatives industrielles. Un véritable moteur d'innovation, mais encore faut-il les découvrir...»

DAVID WAROQUIERS ► «Notre expertise consiste justement à plonger dans l'inconnu pour mettre en lumière de nouvelles fonctions, potentiellement utiles.»

**Peut-on dire que votre domaine connaît un engouement croissant?**

GMR ► «Il y a quarante ans, notre société utilisait à peine une dizaine d'éléments du tableau périodique. Aujourd'hui, rien que mon smartphone en compte plus de 50! Cela en dit long sur les progrès réalisés dans la compréhension des matériaux. En parallèle, cela pose des questions sociétales sur l'utilisation massive des ressources. Là encore, l'exploration peut jouer un rôle pour trouver des alternatives plus écologiques.»

DW ► «Une découverte est parfois synonyme d'optimisation des procédés au sein d'une usine et, in fine, de réduction de son empreinte écologique. Ce n'est pas un hasard si nos sujets d'étude sont étroitement liés à de grands enjeux: des panneaux photovoltaïques aux batteries, en passant par le stockage de l'hydrogène.»





# « Malgré le contexte, nous sommes confiants: deux contrats sont signés et deux sont dans le pipeline »



### Comment expliquer les progrès réalisés dans l'exploration des matériaux?

**GMR** ▶ «À l'origine, les chercheurs n'avaient recours qu'à la simulation physique. Cela revient à prédire, par exemple la transparence d'un matériau, en résolvant des équations. Mais cela prenait un temps fou, puisqu'un seul matériau faisait souvent l'objet d'une thèse entière. Aujourd'hui, on réalise des simulations sur des centaines de matériaux en même temps, car nos méthodes ont évolué. Des algorithmes plus efficaces, stables et professionnels, mais aussi la montée en puissance des ordinateurs, avec des gains importants en termes de stabilité et de vitesse.»

**DW** ▶ «Toutefois, nos calculs continuent de prendre du temps! Mais l'intelligence artificielle et le machine learning ont changé la donne... Ces technologies permettent de passer au crible à haut débit (high-throughput screening) des dizaines de milliers de matériaux pour identifier ceux qui répondent à une série de critères donnés. Cela permet d'aller beaucoup plus loin, puisqu'on prédit sans devoir expérimenter! Grâce à de nouveaux algorithmes d'intelligence artificielle développés spécifiquement pour notre domaine, on peut également attaquer des problèmes avec peu de données. Un véritable atout, car notre domaine ne connaît pas vraiment le big data.»

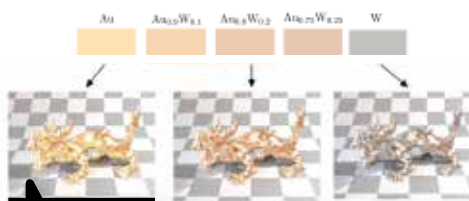
**GMR** ▶ «Autrement dit, nous approchons «virtuellement» la réalité, afin de réduire le spectre. Une fois les résultats obtenus, on les affine par simulation physique. Ce processus débouche aussi sur une augmentation des données disponibles.»

**DW** ▶ «Pour résumer, ce triangle — constitué par la simulation physique, l'intelligence artificielle et l'explosion des données — s'auto-alimente pour accroître la connaissance des matériaux.»

### Que viennent chercher les industriels chez Matgenix?

**GMR** ▶ «Dans l'industrie, on procède par essai-erreur, mais généralement sur base de ce que l'on connaît ou suppose. Un biais cognitif qui réduit le champ d'exploration... Notre approche se débarrasse de ce biais.»

**DW** ▶ «Nous traduisons leurs problèmes en termes techniques et, ensuite, nous leur expliquons dans quelle direction chercher pour atteindre les résultats escomptés. Au final, nous "dériskons" l'ensemble du processus pour les industriels.»



Du jaune à l'orange, ces rendus simulés sur ordinateur d'une surface métallique permettent d'observer la modification de la couleur avec la composition en allant de l'or (Au) au tungstène (W) en passant par différents alliages.

### Un exemple d'application?

**GMR** ▶ «Notre premier client est un bijoutier suisse. Il avait financé un projet académique à l'Université de Lausanne que j'avais supervisé. L'objet? Comment la couleur de l'or est-elle modifiée lorsqu'on l'allie à d'autres matériaux? Avec du cuivre, il devient plus rose; vert clair avec l'aluminium, etc. On l'a fait pour 150 matériaux! Le bijoutier est revenu pour nous proposer d'aller encore plus loin.»

**DW** ▶ «Toyota est un autre client, avec lequel nous travaillons sur le développement de nouveaux matériaux pour le stockage de l'hydrogène.»

### À quel moment avez-vous compris que la demande était suffisante?

**DW** ▶ «Les propositions pleuvaient au sein du labo de l'UCLouvain! Or, l'université a un devoir de partage du savoir. Quand une industrie exige de garder secrets des résultats, cela pose question...»

**GMR** ▶ «Ces projets sortaient de plus en plus du cadre académique, puisqu'ils n'avaient pas vocation à publication!» *Suite en page 14*

### GIAN-MARCO RIGNANESE

# Ingénieur civil en chimie et science des matériaux, 1994, UCLouvain, et Docteur en sciences appliquées, 1998, UCLouvain.

# Durant sa thèse, Gian-Marco Rignanesi effectue un séjour de près d'un an à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne dans le groupe du Pr Roberto Car, comme consultant pour CRAY Research. Il poursuit ses recherches à l'Université de Californie à Berkeley, sous la supervision du Pr Steven Louie. Il obtient un poste permanent à l'UCLouvain en 2003. **Aujourd'hui, il est professeur extraordinaire à l'EPL et directeur de recherche au Fonds de la Recherche scientifique (FNRS).**

# En 2019, il devient «fellow» de l'American Physical Society (APS), reconnu pour ses avancées dans le développement de logiciels open source, dans le domaine des calculs à haut débit pour une grande variété de matériaux.



C'est en juin 2020 que naît Matgenix, cofondée par un quatuor de l'UCLouvain: le Pr Gian-Marco Rignanese et le Dr David Waroquiers, ainsi que le Pr Geoffroy Hautier et le Dr Guido Petretto. Pour accroître sa visibilité et poursuivre sa croissance, la start-up pourra bientôt compter sur la présence d'un démonstrateur chez A6K-E6K, un lieu dédié aux métiers de l'ingénieur. Le but? Montrer aux industriels ce que Matgenix peut leur offrir grâce aux techniques de simulations.

DW ► «Pour nous lancer, nous avons demandé une aide à la Région wallonne dans le cadre du programme First spin-off, octroyée pour deux ans. Malheureusement, nous n'avons pas obtenu la troisième année de financement.»

GMR ► «Disons que la Région wallonne n'a pas cru en nous! Nous, oui... D'autant plus que nous avons un préaccord avec BASF. Un projet légèrement différent, puisqu'ils sont intéressés par notre expertise en automatisation. En bref, lorsque les calculs de simulation sont lancés, il faut les surveiller pour parer à d'éventuels bugs ou crashes. Nous avons mis au point des programmes qui font un "baby-sitting" automatique pour des dizaines de milliers de "bébés" en même temps.»

DW ► «Nous allons les accompagner pour cet outil spécifique, car BASF dispose déjà d'un département de chercheurs, avec des infrastructures de pointe. Leur machine est d'ailleurs plus puissante que Zenobe, le supercalculateur wallon (ndlr prochainement installé chez A6K-E6K).»

### Matgenix est née dans un contexte particulier. Où en êtes-vous actuellement?

GMR ► «Nous avons adopté une stratégie prudente. L'idée est de mener à bien nos premiers projets, d'assurer des revenus et d'asseoir notre crédibilité. Le coronavirus a un peu freiné notre développement, mais nous sommes confiants, puisque deux contrats sont signés et deux sont dans le pipeline.»

DW ► «Notre priorité sera de plancher sur la prospection et certains aspects commerciaux. Nous aurons d'ailleurs un démonstrateur chez A6K-E6K pour montrer aux industriels ce que Matgenix peut leur offrir grâce aux techniques de simulations, au sein d'un écosystème dédié aux métiers de l'ingénieur. Une visibilité internationale similaire est également dans les tuyaux.»

### Si vous pouviez prédire l'avenir, où en serait Matgenix dans un futur proche?

DW ► «Au départ, notre idée était de proposer un Google des matériaux! Un logiciel dans lequel l'industriel rentre une question et reçoit la réponse.»

GMR ► «Aujourd'hui, nous prédisons les propriétés des matériaux. Cet outil ultime ferait l'inverse: quel matériau utiliser pour avoir telle fonction?»

DW ► «Nous avons écarté l'idée... pour l'instant. Un, c'est complexe à réaliser techniquement. Deux, ce n'est pas le souhait actuel de nos clients. L'industriel veut l'expert... donc, nous! Mais Matgenix avancera certainement dans cette direction.»

GMR ► «Pour être précis, une première version existera bientôt. Nous la développons pour le bijoutier suisse, mais ce sera spécifique à son problème: quel matériau utiliser pour obtenir une couleur d'or donnée? Nous avons encore un peu de chemin pour le rendre fonctionnel, facile et efficace.»

DW ► «C'est un processus de développement permanent... Le jour où le Google des matériaux sera au point, ce sera une grande réussite!»

### SOUVENIRS D'ÉCOLE

#### «Le déclic s'est produit lorsque j'ai commencé à travailler sur des projets industriels»

La fascination de **David Waroquiers** pour l'exploration de la matière ne date pas d'hier. «Lors d'un cours sur la simulation, j'avais été bluffé par la possibilité de prédire l'élasticité ou la transparence d'un matériau... uniquement sur base d'équations physiques!», s'enthousiasme-t-il. À tel point qu'une thèse dans le domaine s'est imposée comme une évidence. «Mais cela n'a pas été aussi simple. C'était un peu trop abstrait et "fondamental" pour moi. Je ne voyais plus l'intérêt de ce que je faisais: il me manquait du concret. Après ma thèse, j'ai commencé à travailler sur des projets industriels au sein du labo. Un véritable déclic, dont Matgenix est le prolongement logique.»

#### «Les profs font la différence lorsqu'ils sont capables de transmettre leur passion»

Entré à l'université pour faire de l'informatique, **Gian-Marco Rignanese** décide de suivre une autre voie. «Depuis petit, je bidouillais des programmes, mais je me suis rapidement rendu compte que ce n'était pas ce que je voulais faire», se souvient-il. «J'étais émerveillé par l'utilisation de l'informatique, mais pas par le contenu des cours. Alors je me suis dirigé vers les études d'ingénieur, plus polyvalentes.» Mais cela n'explique pas comment il est devenu un explorateur de la matière... «J'ai découvert les matériaux grâce à mon collègue actuel, **Jean-Christophe Charlier**, et à mon promoteur de thèse, **Jean-Pierre Michenaud**. Ils m'ont offert un cadeau inestimable: la passion. Les professeurs font la différence lorsqu'ils sont capables de la transmettre.»

