Dr PASCAL VIOT
viot@lptl.jussieu.fr
c/o Commission des Thèses en Physique
Université Pierre & Marie Curie Paris 6
Service de la Scolarité – Doctorat
Bureau des HDR
Esc. G, 2ème étage
15 rue de l'École de Médecine
75270 Paris Cedex 06

Saclay, le 28 avril 2009

RAPPORT SUR LE MÉMOIRE D'HABILITATION DU DR DENIS GREBENKOV

Je connais DENIS GREBENKOV depuis l'année 2000, lorsque je l'avais mis en contact avec l'équipe de Bernard Sapoval et Marcel Filoche, au Laboratoire de physique de la matière condensée (LPMC) de l'École polytechnique de Palaiseau, pour un stage de trois mois dit d'option, dans le cadre du programme international de l'École polytechnique. J'ai ensuite été rapporteur de sa Thèse en 2004, avant d'écrire pour lui une lettre de recommandation pour sa candidature au CNRS en section 05 en 2006. Nous nous sommes aussi croisés en 2007, lors d'un long séjour à l'Institute for Pure and Applied Maths (IPAM) de UCLA, dans le cadre du programme *Random Shapes*, organisé par Peter Jones, mathématicien de Yale. J'ai eu le plaisir de le voir développer ses talents scientifiques dans des domaines mélangeant fractals, diffusion et analyse harmonique, à l'interface de la physique statistique, des mathématiques, de l'analyse numérique et plus récemment, de la médecine et de la science des matériaux. Il est maintenant chercheur dans ce même Laboratoire où il a débuté en France, et c'est avec une grande satisfaction que je le vois aujourd'hui postuler au titre de l'Habilitation, au jeune âge de trente ans (!). Je dirai d'emblée que le nombre et la qualité des travaux effectués depuis sa thèse, ainsi que celle du mémoire rédigé (en anglais) pour la soutenance de l'Habilitation justifient pleinement la soutenance de cette Thèse d'Habilitation.

Les 24 articles, publiés dans des revues avec comité de lecture par D. Grebenkov depuis sa thèse en 2004, se répartissent de la manière suivante : *Physical Review Letters* : 4 ; *Review of Modern Physics* : 1 ; *Proceedings of the National Academy of Sciences* : 1 ; *Europhysics Letters* : 1 ; *Physical Review E* : 3 ; *J. Chem. Phys.* : 2 ; *Physica* : 1 ; *Fractals* : 2 ; *Diffusion Fundamentals* : 1 ; *Magnetic Resonance Imaging* : 4 ; *J. of Magnetic Resonance* : 2 ; *Concepts in Magnetic Resonance* : 1. Il faut noter aussi un article invité, plus mathématique, publié dans *Focus on Probability Theory*, ainsi que huit articles publiés comme Actes de congrès (avec comités de lecture). Il s'agit là d'une somme de travail considérable, en particulier si l'on remarque que Denis Grebenkov s'est tourné, à l'issue de ses stages post-doctoraux, vers des applications variées, où il est devenu un collaborateur incontournable. La rédaction, seul, d'un article de revue *« NMR survey of reflected Brownian motion »* dans *Review of Modern Physics* dès 2007 témoigne de la maturité ainsi acquise très rapidement. L'article de revue invité *« Partially reflected Brownian motion : A stochastic approach to transport phenomena »*, à destination mathématique, témoigne quant à lui de la notoriété internationale également acquise auprès de la communauté mathématique intéressée aux phénomènes d'interfaces aléatoires.

Le mémoire d'Habilitation est divisé en trois parties : un premier chapitre « Diffusion, geometry and complexity », un second s'intitulant « Probability insight : Monte Carlo simulations » et enfin un chapitre portant sur « Spectral insight : Laplacian eigenfunctions ».

Le premier chapitre, introductif, explique de manière simple et précise comment la résolution de l'équation de diffusion généralisée

$$\frac{\partial}{\partial t}c(\mathbf{r},t) = D\Delta c(\mathbf{r},t) - \kappa B(\mathbf{r},t)c(\mathbf{r},t),$$

où $c(\mathbf{r},t)$ est une concentration et $B(\mathbf{r},t)$ un champ extérieur (« magnétique »), agrémentée de conditions aux limites variées [Dirichlet, Neumann, ou mixtes de type Robin selon la normale n : $\left(D\frac{\partial}{\partial n} + W\right) c(\mathbf{r},t) = 0$], dans des *géométries complexes*, va être le fil conducteur du mémoire. Cette équation s'applique à divers cas physiques comme la diffusion dans les milieux poreux ou au voisinage de surfaces rugueuses, dans des milieux de structure fractale comme l'acinus des poumons, ou en résonance magnétique nucléaire (où $\kappa = i\gamma$ devient imaginaire pur). Les différents formalismes équivalents : équation de diffusion, formule de Feynman-Kac, mouvement brownien partiellement réfléchi, et enfin développement spectral sur les modes propres du laplacien dans le domaine considéré et avec les conditions aux limites considérées, sont passés en revue en une première dizaine de pages succinctes, mais bien rédigées.

Dans le chapitre deux, Denis Grebenkov présente les résultats obtenus à l'aide de la technique numérique dite de « Geometry adapted fast random walks », dont seul le développement lui a permis d'obtenir des réultats jusqu'alors inaccessibles numériquement. Il a été capable en particulier de mesurer le spectre multifractal de la mesure harmonique près de courbes planaires de Koch de dimension variables, et aussi d'une surface cubique de Koch en *trois dimensions* (3D). La dimension d'information obtenue, $D_1 = 2,007 \pm 0,002$, montre que le célèbre théorème de Makarov en 2D, $D_1 = 1$, pour toute courbe planaire aussi irrégulière fusse-t-elle, ne peut être étendu à 3D, car ici $D_1 \neq 2$. D'une manière plus générale, D. Grebenkov se pose la question de l'accessibilité d'une interface fractale par diffusion. Il montre sur le cas de courbes de Koch triangulaires naturellement *dissymétriques*, que leur spectre harmonique est *symétrique* tant que leur dimension fractale est $D_0 \leq 1,3$; il se scinde en deux spectres qui dépendent du côté d'approche du mouvement brownien pour des dimensions plus grandes. Ces résultats très intéressants demanderaient, à mon avis, une description et une compréhension théoriques approfondies.

Une autre avancée a consisté à définir la mesure harmonique *étalée*, où le mouvement brownien fait un certain nombre de rebonds sur la surface avant d'être absorbé. Elle dépend d'un longueur d'étalement D/W, définie en fonction de la constante de diffusion D et du paramètre W de la condition au bord de type Robin mentionnée plus haut. D. Grebenkov démontre numériquement la pertinence de ce concept pour le spectre multifractal de courbes de Koch carrées, qui passe continûment de celui de la mesure harmonique usuelle à celui de la mesure de Hausdorff. Dans une collaboration fructueuse avec le mathématicien M. Zinsmeister et ses collègues du LPMC, D. Grebenkov revisite la disribution de temps de survol brownien d'un bord fractal, qui obéit à une loi d'échelle incluant la dimension de Minkowski D_0. Cette loi est vérifiée numériquement avec grand soin, là encore pour des courbes de Koch.

Dans ce qui apparaît ensuite comme un tour de force numérique, le problème de la *passivation* des surfaces, d'une grande importance pratique, est abordé dans une publication aux PNAS. L'algorithme de marcheurs aléatoires rapides doit être modifié astucieusement pour permettre l'accès à des zônes de plus en plus géométriquement difficiles lors de la récurrence du processus de passivation. Cela permet d'étudier la passivation de la courbe de Koch carrée jusqu'à la septième génération et, surtout, de la *surface* cubique du même type jusqu'à la cinquième génération. La complexité hiérarchique des régions actives successives ainsi dévoilée est impressionnante. La grande différence d'accessibilité diffusive des sites actifs entre deux et trois dimensions amène à la conclusion que des catalyseurs fractaux construits par *striure* seront plus efficaces que leurs analogues proprement tridimensionnels.

Dans une série importante de cinq articles publiés dans des journaux traitant de résonance magnétique, D. Grebenkov et ses collaborateurs expérimentateurs se sont attaqués en détail au problème de la diffusion dans les poumons et de la détection précoce des emphysèmes pulmonaires. Pour cela, il a modélisé les acini du poumon, où la fin du processus de respiration se produit par diffusion de l'oxygène, par des labyrinthes branchés hiérarchiques dits de « Kitaoka » et réalisé la simulation Monte-Carlo de la diffusion de gaz hyper-polarisés (comme l'Hélium 3). Il s'agit de mesurer l'atténuation du signal dans les expériences de résonance magnétique nucléaire avec en vue un modèle prédictif de diagnostic de l'emphysème par IRM. La géométrie des acini emphysémateux est ici modélisée par suppression aléatoire de parois dans le labyrinthe de Kitaoka. Les résultats significatifs obtenus sont comparés aux résultats d'expériences parallèles de RMN menées sur des modèles en résine epoxy gravés par stéréolithographie. Plus généralement, D. Grebenkov a pu aussi montrer de manière convaincante que les atténuations de signaux RMN sont bien différenciées entre des milieux branchés et des milieux poreux, une prédiction importante pour les applications en RMN.

Le troisième chapitre enfin, traite de l'utilisation théorique, mais aussi pratique et numérique, de la représentation de la diffusion *via* les fonctions propres du Laplacien dans un domaine donné, si complexe fût-il. C'est dans cette partie que le formalisme mathématique est davantage explicité, où D. Grebenkov montre que le processus de diffusion généralisé introduit ci-dessus peut se représenter via l'exponentielle de deux matrices Λ et $\mathcal{B}$ non commutantes, qui sont construites à partir de la suite des valeurs propres du Laplacien et de la projection du champ générique $B(\mathbf{r})$ sur les modes propres. Ce formalisme se généralise aisément à des séquences temporelles arbitraires de champs $B(\mathbf{r})$ variables, nécessaires en RMN, par simple multiplication des exponentielles associées.

Cette partie recouvre l'ensemble des résultats décrits dans l'article de revue publié dans *Reviews of Modern Physics* et de nombreux autres articles de physique par le même auteur. Les résultats explicites en sont nombreux et intéressants : éléments de matrices explicites pour des géométries simples (condensateur plan, disque, sphère) ; définition précise et calcul explicite en l'absence de relaxation de surface, du coefficient de diffusion dépendant du temps $D(t)$ pour tout domaine confinant et tout profil temporel ; séparation des différents régimes de diffusion ; résultats rigoureux en présence de relaxation de surface pour les géométries simples citées ci-dessus, ou pour un profil de champ magnétique en cosinus, avec application à la limite d'applicabilité de l'approximation de phase gaussienne. Enfin, récemment, définition et résolution explicite d'un modèle de diffusion restreinte à deux échelles de longueur (dans des couches sphériques), avec apparition d'un comportement constant intermédiaire du coefficient temporel $D(t)$, dans une plage située entre temps courts et temps longs. Ce résultat est un premier pas important dans la compréhension du comportement en plateaux successifs attendu pour des systèmes *multi-échelles*. Le même formalisme matriciel est enfin utilisé pour étudier les propriétés du temps local d'occupation des bords (temps dit de résidence) par le mouvement brownien de diffusion réfléchi. Les résultats portent sur le comportement à grand temps des moments de ce temps de résidence.

De nombreux projets de recherche interdisciplinaires convaincants sont aussi décrits par Denis Grebenkov, qui vont de projets en cours avec des mathématiciens (dont A. Batakis et M. Zinsmeister de l'Université d'Orléans), en passant par des projets avec les physiciens du LPMC de l'École polytechnique et de l'U2R2M de Paris XI, à des projets en médecine (avec par exemple la modélisation du transport dans le tissu intersticiel de la peau, ou le transport diffusif dans le placenta avec le Dr Salafia de NYU, médecin très actif et reconnu dans ce domaine.

Ce manuscript est clairement rédigé et met en lumière de manière introductive, concise et récapitulative les travaux interdisciplinaires originaux conduits par D. Grebenkov. Un regret : qu'une sélection des articles les plus marquants ne soit pas mise en appendice, ce qui pourrait être fait dans la version définitive.

En conclusion, ce mémoire d'Habilitation démontre sans conteste que Denis Grebenkov a produit en peu de temps un ensemble de résultats originaux qui lui assurent aujourd'hui une place tout à fait reconnue dans la recherche au niveau international. Il possède la particularité d'aborder avec passion et efficacité des sujets réellement interdisciplinaires, ce qui constitue une qualité remarquable. Par ailleurs, le fait qu'il ait déjà co-supervisé plusieurs étudiants en thèse et en stages pré- et post-doctoraux, montre qu'il est plus qu'apte à diriger des recherches. Je soutiens donc sans réserve la soutenance de cette thèse.

BERTRAND DUPLANTIER

Directeur de recherche CEA & CNRS
Institut de Physique Théorique, Orme des Merisiers, CEA/SACLAY
F-91191 Gif-sur-Yvette Cedex
Bertrand.Duplantier@cea.fr
Tel. : 33 (0)1 69 08 74 67 ; Fax : 33 (0)1 69 08 81 20