

F O C U S

MATÉRIAUX NUMÉRIQUES

Contacts : Henry Proudhon, Centre des matériaux (CNRS/Mines Paris - PSL), henry.proudhon@cnrs.fr et Romain Quey, Laboratoire Georges Friedel (CNRS/Mines Saint-Etienne), romain.quey@cnrs.fr

Les matériaux numériques traitent tous les stades de la vie d'un matériau, de son élaboration à son utilisation dans des applications variées (énergie, transports, etc.), jusqu'à son réemploi ou recyclage. Cette thématique se trouve au cœur du triptyque élaboration-microstructures-propriétés et joue un rôle essentiel dans la découverte de nouveaux matériaux et l'optimisation des propriétés spécifiques. Elle constitue une des clés permettant d'améliorer l'efficacité énergétique et de garantir la sûreté des systèmes.

Des modèles à toutes les échelles, le paradigme ICME

Les microstructures des matériaux mettent en jeu une imbrication d'échelles liée à leurs hétérogénéités, du sub-nanométrique (atome) au sub-millimétrique (grains d'un polycristal, fibres d'un composite, etc.), et peuvent également inclure une architecture (méta-matériaux). Autant de modèles de simulation ont été mis au point pour décrire leur comportement.

Ces modèles permettent non seulement de déterminer le comportement (mécanique) d'un volume représentatif de matériau, mais aussi de mettre en évidence la fantastique hétérogénéité des champs qui se développent en son sein et qui gouvernent de nombreuses propriétés (tenue en fatigue, etc.).

L'évolution des microstructures au cours de la déformation ou, plus généralement, au cours de l'élaboration du matériau, peut également être modélisée pour rendre compte de phénomènes tels que la recristallisation ou les transformations de phases dans les alliages métalliques, lesquels constituent des leviers importants pour optimiser les microstructures.

Un défi actuel majeur est de chaîner les modèles, en échelles physiques et en temps, dans une approche dite d'« ingénierie numérique intégrée des matériaux » (de l'anglais « integrated computational materials engineering », ICME).

Dialogue expériences-simulations en 3D

La validation des modèles passe par un dialogue fort avec l'expérience. Des approches développées récemment permettent de suivre, en 3D et au cours de sollicitations diverses (déformation, température, etc.), la déformation locale (mesures de champs), le développement des contraintes ou encore l'évolution de la microstructure.

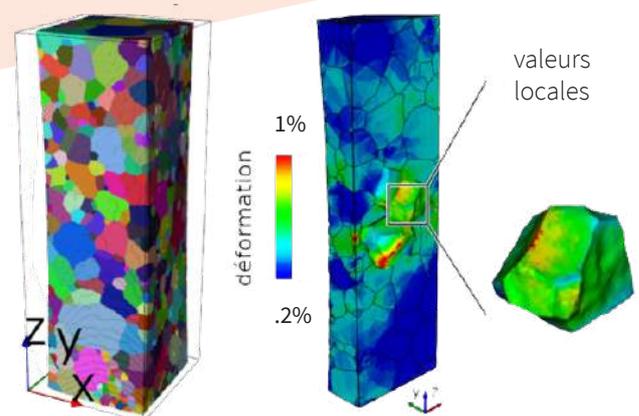
La présence sur le territoire de deux synchrotrons (ESRF et SOLEIL) et le transfert des méthodes vers les équipements de laboratoire offrent en cela d'importantes opportunités.

Émergence d'une plateforme ICME

Les progrès constants en modélisation contribuent à l'émergence d'une plateforme de simulation intégrée. Idéalement, cette plateforme devra être ouverte et mettre en œuvre des standards de données permettant d'en accélérer l'adoption, la dissémination et l'utilisation. Associée à des principes FAIR, elle contribuera à l'émergence d'une très riche base de données sur les matériaux. Les approches de sciences de données et d'intelligence artificielle contribueront à ces avancées.

Structuration nationale

Les démarches structurantes abondent à l'échelle nationale, notamment via des groupements de recherche de l'INSIS (FIBMAT, HEA, ARCHIMETA, etc.). L'association MECAMAT et la Société française de métallurgie et de matériaux se sont également associées dans le cadre d'un [groupe de travail](#) sur ce thème. Les « journées matériaux numériques », organisées tous les 2 ans et dont la 5ème édition a eu lieu en septembre 2022, sont aussi un lieu d'échange privilégié pour la communauté. Des infrastructures nationales pour le calcul numérique de très haute performance sont également disponibles ([GENCI](#)), notamment au travers du supercalculateur Jean Zay, opéré par le CNRS.



Simulation numérique à partir d'une microstructure expérimentale obtenue par tomographie aux rayons X.