

## Chapitre 7 : La conception des futurs matériaux passe par le numérique.

### La simulation numérique au cœur de l'Industrie 4.0 de l'élaboration, de la transformation et du recyclage des matériaux

**Marc Bernacki et Nathalie Bozzolo ; MINES ParisTech CEMEF, Sophia Antipolis  
Benoît Appolaire, Institut Jean Lamour, Nancy**

**Mots Clefs :** Industrie du futur, Matériau numérique, Simulation numérique à haute performance, Nouveaux matériaux, Nouveaux procédés

L'importance de la simulation numérique pour la recherche en Science des Matériaux n'est plus à démontrer et elle constitue le socle de l'Industrie 4.0, que ce soit pour l'élaboration, la transformation ou encore le recyclage des matériaux. Présente dans le paysage de la recherche académique et industrielle depuis une trentaine d'années, elle sert généralement l'un des trois objectifs suivants, le plus souvent interdépendants :

- la découverte et le développement de nouveaux matériaux et alliages ;
- l'optimisation d'alliages existants vis-à-vis de leurs propriétés ;
- et l'optimisation de procédés en termes d'efficacité (économies d'énergie et de matière) et de robustesse.

L'évolution du domaine suit l'accroissement continu de la puissance des moyens de calcul. Parce qu'il est maintenant possible de réaliser des simulations de plus en plus réalistes à une échelle donnée, on a perçu plus récemment tout l'intérêt pour les matériaux de structure

- de simulations multi-échelles et multiphysiques,
- et d'une démarche dite ICME (*Integrated Computational Materials Engineering*), où les processus d'optimisation intègrent tous les maillons de la chaîne de production et d'utilisation d'un matériau. Ces deux items sont bien évidemment liés, toutes les échelles étant impliquées dans l'ICME, et les simulations multi-échelles trouvant souvent leur intérêt dans une optique ICME.

#### Constat Post COVID sur le thème

Dans le contexte de la crise sanitaire 2020, les difficultés de déplacement des personnes et d'accès aux moyens expérimentaux ou industriels ont plus que jamais fait apparaître qu'il est essentiel de disposer de moyens de calculs numériques, non seulement pour accélérer l'innovation (dans la logique Industrie 4.0), mais aussi, parfois, pour éviter l'interruption totale d'activité.

Simuler les matériaux et les procédés associés permettra un gain de temps considérable dans le développement des matériaux et procédés du futur. Aujourd'hui, le « matériau numérique » commence à être employé pour des pièces à haute valeur ajoutée, il est destiné à se généraliser et à court terme conditionnera la compétitivité de nos entreprises.

Les gains considérables de performance des moyens de calcul, des méthodes numériques et des techniques expérimentales dans la dernière décennie permettent aujourd'hui d'avoir accès à

## Les Matériaux, au cœur des enjeux stratégiques Post COVID

---

l'information locale au cœur de la matière et de la modéliser. De nouvelles stratégies de modélisation commencent donc à apparaître où la physique considérée dans les simulations à l'échelle macroscopique se nourrit de simulations réalisées à l'échelle de la microstructure. Tous les types de matériaux, et donc tous les secteurs d'activités seront à terme concernés par cette révolution.

### **Alerte / Enjeu N°1 : La France ne doit pas manquer de se placer parmi les leaders mondiaux du « matériau numérique »**

La thématique du matériau numérique est en pleine expansion et deviendra vite un gage de compétitivité pour l'élaboration et la mise en forme des matériaux du futur. Également connue sous la désignation ICME (*Integrated Computational Materials Engineering*) et considérée comme stratégique depuis plusieurs années dans le monde anglosaxon, la thématique a bénéficié et continue de bénéficier de financements très importants, notamment aux Etats-Unis<sup>[1]</sup>. Si l'on veut que la simulation numérique en métallurgie et plus largement que le matériau numérique contribue de manière efficace aux enjeux de société que la crise du Covid a exacerbés, à savoir l'impact environnemental et la réindustrialisation du pays, il paraît nécessaire de soutenir un programme national sur l'exemple du Materials Genome Initiative aux USA, qui a ses contreparties en Chine et en Allemagne. La France fait partie des pays les plus en pointe pour le développement et l'utilisation d'outils numériques sur plusieurs segments du domaine, cette position doit être maintenue en continuant et en amplifiant les efforts de recherche et de transfert industriel dans le domaine. Un grand programme national associant les meilleurs laboratoires académiques et les acteurs industriels serait un dispositif adapté pour relever ce défi.

### **Recommandations/ Propositions :**

La science des matériaux et donc le matériau numérique engagent toutes les échelles depuis celle des électrons jusqu'à celles des structures. Aussi, la difficulté essentielle de simulations pertinentes, qu'on s'intéresse aux propriétés ou aux procédés, tient à cette imbrication d'échelles. De manière théorique, on peut dessiner des schémas où les différentes échelles sont représentées et reliées dans un mouvement ascendant. En pratique, il faut reconnaître que très peu d'études ont réussi à associer plus de deux échelles. Ce constat suggère que l'effort pour dépasser deux échelles est considérable et généralement hors de la portée d'une seule ou deux équipes, en particulier dans des projets de recherche aux enveloppes budgétaires très contraintes. La démarche qui semble la seule viable, même avec des moyens de calcul croissants et même en supposant que leur croissance continuera de s'accélérer, consiste en un chaînage de modèles aux différentes échelles, en profitant par ailleurs des nouvelles possibilités offertes par l'intelligence artificielle.

En examinant les succès et les échecs dans le domaine de par le monde ces dernières années, un programme ambitieux mais réaliste, évitant les écueils qu'ont rencontrés nos prédécesseurs, pourra être construit en s'appuyant sur les compétences présentes dans nos laboratoires de recherche. Fédérer la communauté autour de ces sujets dont se réclament déjà de nombreuses équipes dans un grand programme national permettra de structurer et d'augmenter l'efficacité de l'activité française sur ces sujets. En s'inspirant des grands organismes publics de recherche qui se sont déjà emparés du sujet, grâce à leur structuration autour de missions bien définies, il est temps de construire un programme ambitieux.

Pour qu'il soit efficace, un tel programme ne doit pas se disperser sur de trop nombreuses familles de matériaux présentant des spécificités très différentes en termes de procédés et de propriétés. Il sera donc nécessaire de réfléchir à l'opportunité de développer un programme tenant compte des matériaux d'intérêt stratégique tels ceux garantissant la compétitivité de l'industrie aéronautique française (superalliages, alliages de titane), mais également de la potentialité de nouveaux matériaux

## Les Matériaux, au cœur des enjeux stratégiques Post COVID

---

comme les alliages à haute entropie ou de nouveaux procédés comme la fabrication additive, tout en intégrant les enjeux environnementaux sur l'utilisation de ressources disponibles et non-polluantes.

Par ailleurs, il faudra imaginer un cadre suffisamment flexible pour préserver la liberté, et donc la créativité, des différents acteurs. Cela passera sûrement par la définition de formats d'échanges et l'implémentation/adaptation d'outils dédiés, en examinant attentivement ce que peuvent apporter certaines pratiques en science de l'information et des données.

Il est par ailleurs essentiel d'assurer la transférabilité des outils en milieu industriel, ce qui suppose l'implication des industriels des secteurs concernés dès la construction et dans toutes les phases du projet.

### **Alerte / Enjeu N°2 : La formation de jeunes talents dans le domaine du matériau numérique**

Le déploiement du matériau numérique dans le secteur industriel est également une opportunité d'emploi de jeunes talents formés à ces nouveaux outils.

### **Recommandations/ Propositions :**

Promouvoir le matériau numérique dans les programmes de formation d'ingénieurs en sciences et génie des matériaux et développer une offre de formation continue pour l'adaptation des personnels en poste à ces nouveaux outils. Ces formations pourraient du reste être adossées au grand programme national évoqué ci-dessus.

### **Conclusion**

La révolution numérique est en marche dans le secteur des matériaux. La crise sanitaire du COVID 19 et les difficultés de toutes sortes qu'elle a engendré dans le secteur industriel, ont révélé l'urgence de disposer d'outils numériques prédictifs performants et robustes. La France doit maintenir et conforter sa position parmi les pays les plus en pointe dans le développement et l'industrialisation du « matériau numérique » pour garantir la compétitivité de ses entreprises. Elle peut pour cela s'appuyer sur ses centres de recherche d'excellence et un tissu industriel proactif dans le domaine.

### **Référence**

[1] "Modeling Across Scales: A Roadmapping Study for Connecting Materials Models and Simulations Across Length and Time Scales". A Study Organized by The Minerals, Metals & Materials Society. Copyright © 2015 by The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, PA 15086.

DOI: 10.7449/multiscale\_1 ISBN: 978-0-692-37606-5

Electronic copies of this report are available online at [www.tms.org/multiscalestudy](http://www.tms.org/multiscalestudy)