

Méthode de « champ de phase » en science des matériaux

Marc Bernacki, CEMEF, Mines Paristech Sofia Antipolis

La physique des milieux hétérogènes englobe un nombre toujours plus vaste de sujets théoriques et technologiques. Cette notion sous-tend au difficile exercice de décrire, dans les systèmes physiques d'intérêt, l'ensemble des interfaces présentes, synonymes en général, de discontinuités topologiques, morphologiques et des propriétés. Par ailleurs, ces interfaces peuvent être mues par leur propre cinétique inhérente à une recherche d'équilibre thermodynamique.

Depuis 50 ans, l'approche « champ de phase » a été enrichie sur le plan théorique et numérique afin de répondre au besoin de description de ces problèmes d'interfaces dans les simulations. Il est aisé de comprendre par la nature multiéchelles et multiphysiques des problématiques d'interfaces que des approches « champ de phase » soient aujourd'hui utilisées aux échelles atomistique, mésoscopique et macroscopique pour un spectre d'applications très large en mécanique du solide, des fluides et en science des matériaux.

Cette présentation s'attachera à décrire succinctement les bases théoriques des approches « champ de phase » et leurs évolutions dans l'état de l'art en se « limitant » à la métallurgie computationnelle à l'échelle mésoscopique pour laquelle les applicatifs sont déjà légion : solidification, recristallisation et croissance de grains, changement de phase à l'état solide, densification en métallurgie des poudres, mûrissement d'Ostwald, globularisation, endommagement...

Ces approches seront également introduites vis-à-vis de leur originalité par rapport aux autres méthodes numériques existantes : formalisme de type « capture d'interfaces » versus « suivi d'interfaces » et description d'interfaces « diffuses » plutôt que « nettes ».

Enfin, une discussion sur l'implémentation pratique de ces méthodes, le choix et/ou l'acquisition des paramètres nécessaires et leur coût numérique sera introduite.