

# Informatique des matériaux : comment combiner puissance des calculs *ab initio*<sup>1</sup> à haut débit et l'intelligence artificielle ?

*Gian-Marco Rignanese, Institute of Condensed Matter and Nanosciences (Université catholique de Louvain), School of materials sciences and engineering Northwestern polytechnical University Xian (Chine).*

*Gian-Marco Rignanese est professeur à l'Université catholique de Louvain (Belgique) et directeur de recherche au F.R.S.-FNRS, l'équivalent du CNRS en Belgique. Son domaine de recherche est la simulation *ab initio* et l'apprentissage automatique pour la prédiction des propriétés des matériaux. Il a notamment contribué au développement de divers logiciels libres permettant ce type de simulations ainsi que le calcul *ab initio* à haut débit grâce aux supercalculateurs<sup>2</sup>.*

1. *Ab initio* : depuis les premiers principes, c'est-à-dire les lois de la mécanique quantique et l'électromagnétisme sans recours à des données expérimentales.

2. Ordinateur capable de réaliser un nombre très élevé d'opérations et de calculs par unité de temps.

## Introduction

Tout au long de l'Histoire, les méthodes et concepts ont évolué en science des matériaux. Prenons l'exemple du feu. Il a été découvert un peu par hasard il y a des centaines de milliers d'années. À partir de l'Antiquité, il fut considéré (avec l'eau, la terre, l'éther, et l'air) comme l'un des 5 éléments formant la matière qui constitue l'Univers (*Figure 1*).

Avec l'évolution des sciences vers une compréhension de

plus en plus fine des choses (notamment grâce à la mécanique quantique), il s'est avéré que cette vision était complètement erronée. En fait, la chaleur générée par une combustion amène les électrons des molécules (ou des atomes), qui composent l'air ambiant, dans un état d'énergie élevée, dit *état excité*. Et de la lumière est émise lorsque ces électrons redescendent à un niveau d'énergie inférieur, dit *état fondamental* (*Figure 2*).

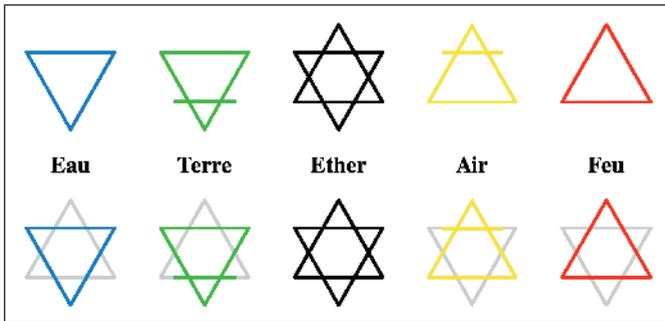


Figure 1

Les 5 éléments.

## 1 Premier paradigme : la science empirique

Cet exemple du feu montre que l'empirisme a existé depuis le début de l'humanité, dès l'âge de Pierre. La roue n'a d'ailleurs pas été découverte du premier coup, il y a eu de nombreux essais et erreurs (*Figure 3*). Cette approche est encore aujourd'hui le cœur de la recherche expérimentale empirique.

Prenons l'exemple plus récent de **la lampe à incandescence**,

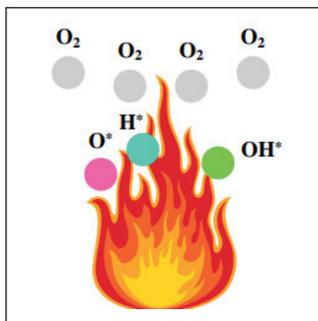


Figure 2

Le feu - les électrons des molécules (ou des atomes) de l'air ambiant excités par la chaleur retournent à leur état fondamental en émettant de l'énergie lumineuse.



Figure 3

L'invention progressive de la roue.

même si elle n'existe plus de nos jours. Lors de sa mise au point en 1879, Edison a testé comme filament près de 3 000 matériaux différents (y compris du papier, du carbone, de l'écorce d'arbre et même un poil de barbe de son assistant) (Figure 4). Après ces nombreux essais et erreurs, il a retenu une fibre de coton carbonisée. Ce n'est que quelques années plus tard que le tungstène a fait son apparition comme filament. Il fut pourtant le matériau longtemps utilisé dans nos lampes à incandescence. Cet exemple montre une des limites des essais empiriques. En effet, Edison n'a pu tester que les matériaux qu'il avait sous la main.

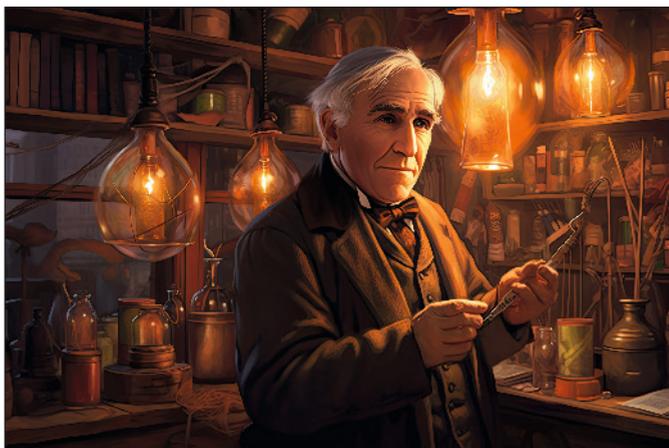


Figure 4

Lampe avec un fil à incandescence de Thomas Edison.

Source Adobe Stock

## 2 Deuxième paradigme : la science théorique

L'approche expérimentale est restée celle privilégiée pendant longtemps. La **science empirique** est le premier paradigme qui a été utilisé en sciences (Figure 5). Vers la fin du XVI<sup>e</sup> siècle, des lois physiques et chimiques ont petit à petit été établies pour mieux décrire les phénomènes se déroulant aux différentes échelles.

La **science théorique** est ainsi devenue le deuxième paradigme utilisé pour approcher les sciences en général, et donc pour ce qui nous intéresse la connaissance des matériaux.

En sciences des matériaux, il s'agit d'établir des lois scientifiques de cause à effet entre le procédé utilisé, la structure qui en résulte, les propriétés qui en dérivent, et finalement la performance qui en découle dans une application particulière, comme schématisé sur la Figure 6.

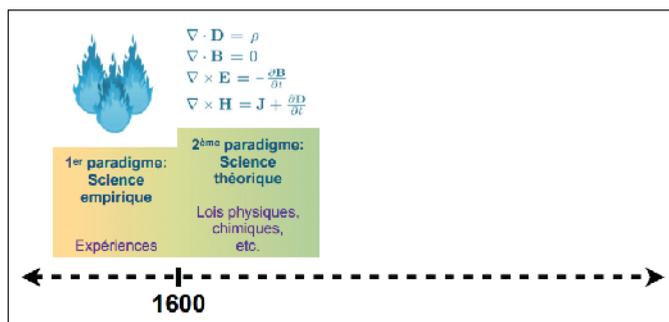


Figure 5

Frise chronologique des paradigmes – 1600.

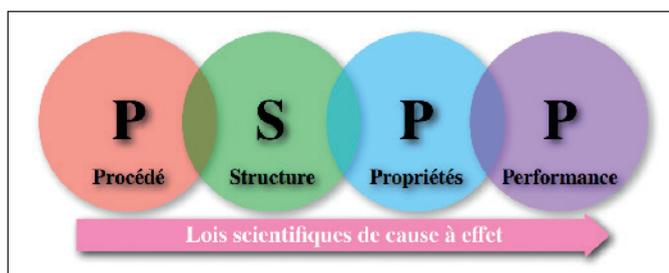


Figure 6

Quadriptyque des lois scientifiques de cause à effet en science des matériaux.

Ces lois scientifiques impliquent des phénomènes et des échelles de longueur/ temps différentes. Prenons comme exemple (Figure 7) la comparaison des échelles de longueur dans deux cas : la capture de la lumière par une forêt ou par des

modules photovoltaïques. Les systèmes de départ sont à l'échelle du mètre. Descendons en dimension dans la connaissance des deux systèmes : à l'échelle du centimètre ( $10^{-2}$  m), les feuilles sont à comparer aux cellules photovoltaïques, puis

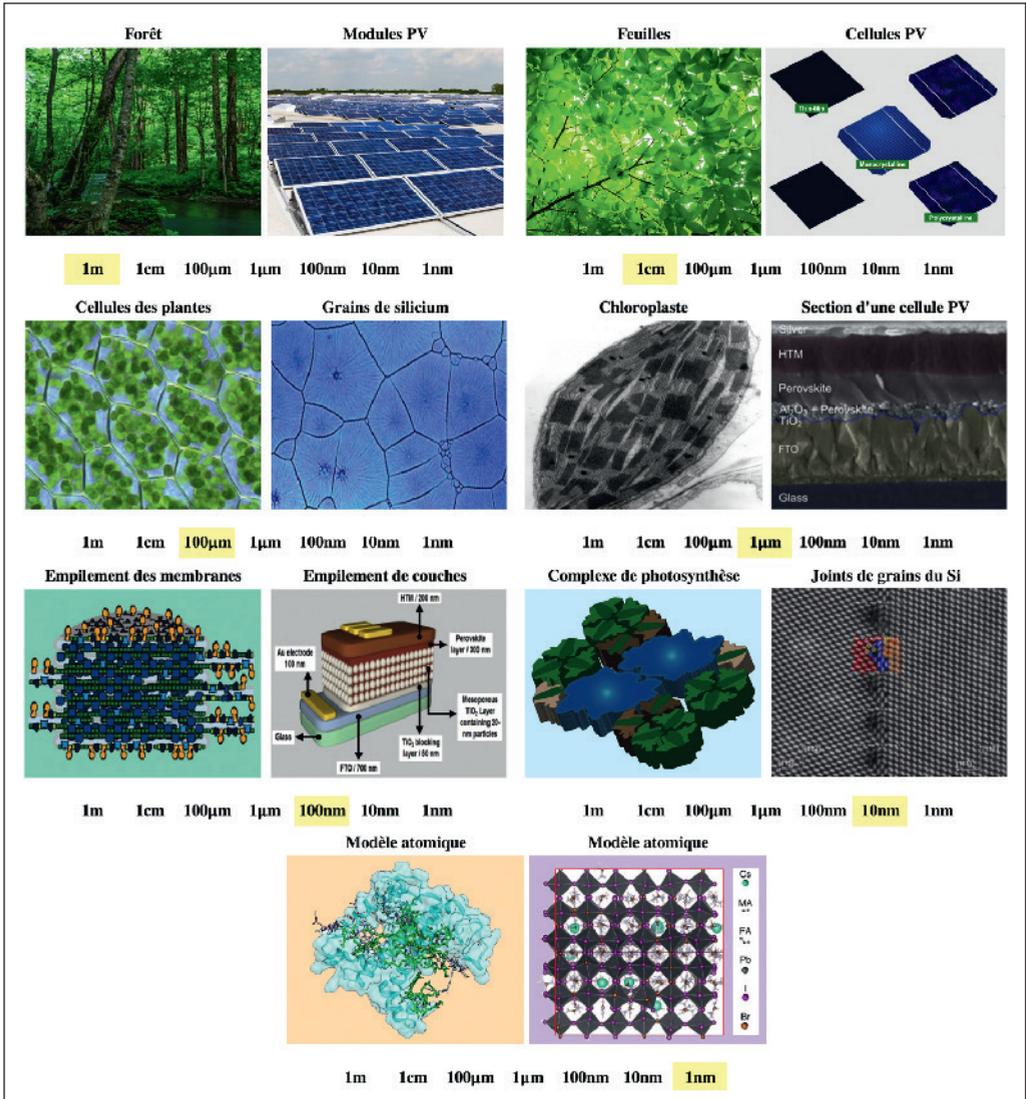


Figure 7

Illustration des différentes échelles de longueur importantes pour la capture de lumière par une forêt d'une part et par un module photovoltaïque d'autre part.

les cellules des plantes aux grains de silicium, à l'échelle du micromètre ( $10^{-6}$  m), le chloroplaste<sup>3</sup> peut être comparé à une section de la cellule photovoltaïque, puis les empilements membranaires avec les empilements de couches dans le matériau de la cellule photovoltaïque, et enfin le complexe de la photosynthèse avec les joints de grain du silicium<sup>4</sup>. À l'échelle du nanomètre ( $10^{-9}$  m), il y a dans les deux cas des atomes.

Il n'est pas nécessaire de descendre à des échelles plus petites pour essayer de comprendre les propriétés des matériaux. Par contre, selon l'échelle à laquelle on se place, il est important de comprendre que les phénomènes qui se déroulent sont différents, et il en est de même pour les échelles de temps. À titre d'exemple, certains phénomènes peuvent se dérouler sur une durée de l'ordre de la femtoseconde, soit un milliardième de milliardième de seconde.

### 3 Troisième paradigme : la science computationnelle

Le développement des ordinateurs puis des supercalculateurs a révolutionné le monde. En 1945, un des premiers ordinateurs, l'ENIAC, pouvait exécuter de l'ordre

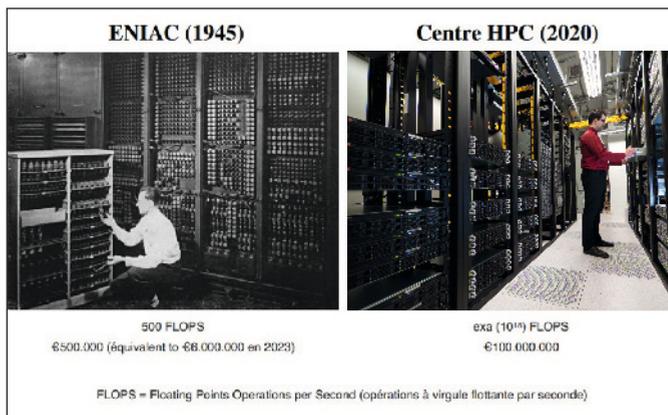


Figure 8

De l'ordinateur au supercalculateur et au centre de calculs.

Sources : Photo Gauche [https://fr.wikipedia.org/wiki/ENIAC#/media/Fichier:ENIAC-changing\\_a\\_tube.jpg](https://fr.wikipedia.org/wiki/ENIAC#/media/Fichier:ENIAC-changing_a_tube.jpg), Photo Droite Adobe Stock

de 500 opérations en virgule flottante<sup>5</sup> (Figure 8). Il coûtait l'équivalent actuel de 6 millions d'euros. Aujourd'hui, avec une somme environ quinze fois plus grande, vous avez non pas un ordinateur, mais un centre de calcul qui exécute  $10^{18}$  (un milliard de milliards) opérations par seconde. Le gain de puissance a donc été exponentiel.

5. La rapidité de calcul d'un ordinateur est mesurée par le nombre d'opérations en virgule flottante qui peuvent être effectuées par seconde (en anglais : *floating-point operations per second* ou FLOPS). Le terme de virgule flottante se réfère au fait que les calculs (additions ou multiplications) peuvent être effectués tant pour de très grands que pour de très petits nombres en les représentant par une mantisse et un exposant (en notation binaire, la mantisse est le nombre initial sans virgule et l'exposant indique la position de la virgule). Les opérations en virgule flottante prennent nettement plus de temps de calcul que des opérations sur les nombres entiers.

3. Fait partie de la cellule végétale et assure entre autres la photosynthèse.

4. Interface entre deux cristaux qui ont des orientations différentes.

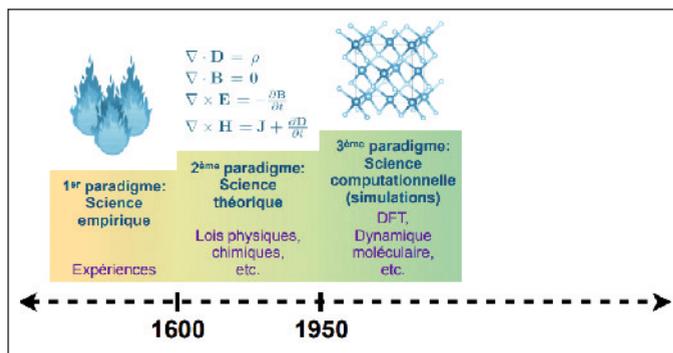


Figure 9

Frise chronologique des paradigmes – 1950.

En science des matériaux, les supercalculateurs ont permis de numériser les lois physiques et donc de réaliser des expériences virtuelles. Il est ainsi devenu possible de faire des prédictions, ce qui a induit un nouveau changement de paradigme : le passage à **la science computationnelle** (Figure 9).

Différentes échelles de longueur/temps peuvent être simulées à partir de différentes

méthodes selon la précision requise (Figure 10). Le **calcul *ab initio*** est la technique la plus précise (en bas à gauche sur le schéma). Il nécessite de prendre en compte explicitement le comportement des atomes et de leurs électrons par le biais des lois de la mécanique quantique et de l'électromagnétisme, sans avoir recours à des données expérimentales. Cette technique permet de prédire toute une série de propriétés des matériaux avec un très bon accord avec celles mesurées expérimentalement. Toutefois, cette précision va de pair avec un temps de calcul nécessaire fort important même sur des supercalculateurs. Dès lors, les systèmes qui peuvent être ainsi simulés sont typiquement constitués de quelques centaines d'atomes, soit sur une échelle allant de l'Angström ( $1\text{\AA} = 10^{-10}\text{ m}$ ) au nanomètre ( $10^{-9}\text{ m}$ ), et ce, sur une échelle de temps également très faible, celle des femtosecondes ( $10^{-15}\text{ s}$ ).

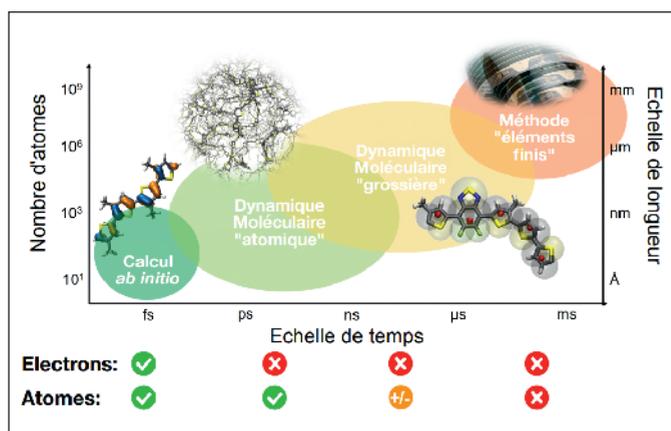


Figure 10

Précision des différentes méthodes de calcul en fonction des échelles longueurs/temps des systèmes et phénomènes à simuler.

Pour passer à des échelles de longueur et de temps supérieures, il n'est plus possible de considérer les électrons explicitement : il faut traiter les atomes dans leur ensemble. La technique de simulation de choix est la **dynamique moléculaire « atomique »**. En acceptant de perdre en précision suite à l'approximation des interactions interatomiques par des potentiels empiriques ou au mieux semi-empiriques<sup>6</sup>, il est possible de gagner en termes d'échelle de longueur (pour atteindre quasiment le micromètre,  $10^{-6}$  m) et de temps (pour simuler jusqu'à quelques nanosecondes,  $10^{-9}$  s). En sacrifiant encore la fidélité du modèle en ne traitant plus que les interactions entre groupes d'atomes par le biais de la **dynamique moléculaire « grossière »**, les échelles sont encore augmentées pour atteindre des longueurs de quelques centaines de micromètres et des durées proches de la milliseconde. Finalement, afin d'atteindre des échelles de longueur et de temps encore plus élevées, il devient nécessaire de considérer les matériaux comme des milieux continus (sans même

6. Les potentiels empiriques ont une forme analytique et les paramètres qui interviennent sont ajustés de façon à ce que les résultats soient en bon accord avec les expériences disponibles. Dans ces conditions, il est quasiment impossible de se faire une idée de la qualité des prédictions. Les potentiels semi-empiriques ont également une forme analytique mais les paramètres sont ajustés à la fois sur les expériences disponibles et sur d'autres calculs plus précis. La qualité des prédictions peut être testée par comparaison avec quelques nouveaux calculs plus précis.

traiter les atomes de façon explicite) et d'avoir recours à la **méthode des « éléments finis »**. Elle permet de simuler des matériaux à des dimensions qu'on peut voir à l'œil nu, mais elle requiert d'introduire divers paramètres dans les modèles dont la valeur est obtenue empiriquement, ce qui réduit encore la précision.

### 3.1. Utilisation du calcul *ab initio* pour la conception de matériaux

La conception de matériaux vise à trouver ceux dont les propriétés respectent un ensemble de critères liés à une application particulière. Par exemple, le matériau qui constitue les écrans des téléphones portables doit être à la fois transparent à la lumière (afin que nous puissions voir les informations qui apparaissent dessus) et conducteur (pour permettre la transmission de signaux électriques au contact de nos doigts). Comme nous l'avons vu pour le cas de la lampe à incandescence, l'approche par essai et erreur peut être longue et coûteuse. Aujourd'hui, le calcul *ab initio* a atteint une maturité telle qu'il permet d'accélérer fortement ce processus de sélection grâce au **criblage à haut débit**.

En effet, ayant vu le jour dans les années 1980, le calcul *ab initio* s'est fortement développé dans les années 2000. Alors qu'au début, une thèse de recherche basée sur cette approche permettait d'étudier quelques propriétés pour un seul matériau, de nos jours, grâce à l'augmentation de la puissance des supercalculateurs, à la stabilité des

programmes informatiques et à une automatisation des calculs, il est possible de prédire de nombreuses propriétés pour plusieurs milliers voire centaines de milliers de matériaux. Typiquement, le criblage à haut débit agit comme un entonnoir (Figure 11). La propriété requise la moins coûteuse en temps calcul (propriété 1) est déterminée pour tous les matériaux envisagés (de l'ordre de  $10^3$  à  $10^5$ ). Ne sont retenus à l'étape suivante que ceux pour lesquels la propriété 1 rencontre le critère de sélection, ce qui réduit le nombre de matériaux qui seront considérés pour le calcul de la propriété 2. Au fur et à mesure que de nouvelles propriétés sont calculées, les critères de sélection se font de plus en plus stricts et le nombre de matériaux diminue considérablement (ce qui permet au passage de faire des calculs plus complexes et donc plus coûteux).

Ce tri se termine généralement avec de l'ordre de dix à une centaine de matériaux qui remplissent tous les critères et qui peuvent donc être proposés aux expérimentateurs pour qu'ils soient validés. Le dernier mot revient à l'approche expérimentale qui reste donc toujours très importante. Les changements de paradigme ne font pas disparaître les anciens. Mais si le travail de simulation a été bien fait, cette technique fait gagner beaucoup de temps aux expérimentateurs qui font ensuite la synthèse et caractérisent les matériaux triés.

Le haut débit (le fait de pouvoir traiter beaucoup de matériaux en un temps restreint) est fondamental dans cette démarche. C'est lui qui permet d'accélérer la conception. Il est atteint grâce à l'automatisation des calculs.

Afin d'illustrer cette approche, prenons l'exemple de la conception de matériaux absorbants des cellules

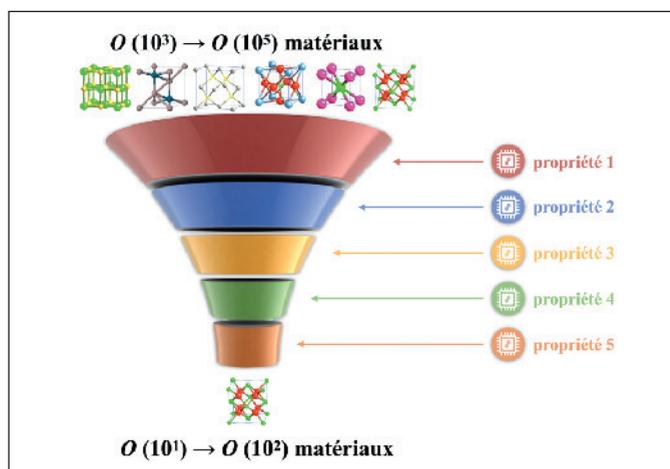


Figure 11

Principe de l'entonnoir pour le criblage à haut débit des matériaux. Partant de  $10^3$  à  $10^5$  matériaux, il permet d'en identifier 10 à 100 dont les propriétés rencontrent les critères requis.

photovoltaïques. Ces matériaux constituent la couche qui capture la lumière du soleil et la convertit en électricité. Pour que cela soit possible, ces matériaux doivent avoir des propriétés qui respectent toute une série de critères. Ainsi, au niveau de leurs propriétés électroniques, la bande interdite<sup>7</sup> doit être

suffisamment petite pour permettre de capturer des photons<sup>8</sup>. Mais ils doivent aussi être stables thermiquement, être de bons conducteurs, et idéalement être peu sensibles à la présence de défauts qui limitent la production électrique. Ces différentes propriétés seront donc calculées les unes après les autres et permettront un filtrage tout au long de l'entonnoir de criblage (Figure 12). Dans l'étude en question [D. Dahliah et al., *Energy Environ. Sci.* 14, 5057 (2021)], il s'agissait de cribler près de 8 000 matériaux à base de cuivre (un élément assez abondant sur terre). En bout de course, il n'en restait plus que 6. Il arrive qu'une même propriété soit calculée plusieurs fois au cours du

7. La mécanique quantique a permis de montrer que dans un atome isolé, les électrons ne peuvent posséder que des énergies de valeurs discrètes et bien définies, par contraste au continuum d'énergie dans le cas d'un électron parfaitement libre (non lié à un atome). Dans un solide, la situation est intermédiaire : l'énergie d'un électron peut avoir n'importe quelle valeur à l'intérieur de certains intervalles, les bandes d'énergies permises. Ces intervalles sont séparés des bandes d'énergie interdites (ou, plus simplement, bandes interdites) dans lesquelles on ne trouve aucun niveau d'énergie accessible aux électrons.

8. En mécanique quantique, un photon est un paquet d'énergie élémentaire associé à une onde électromagnétique (par exemple, une onde de lumière).

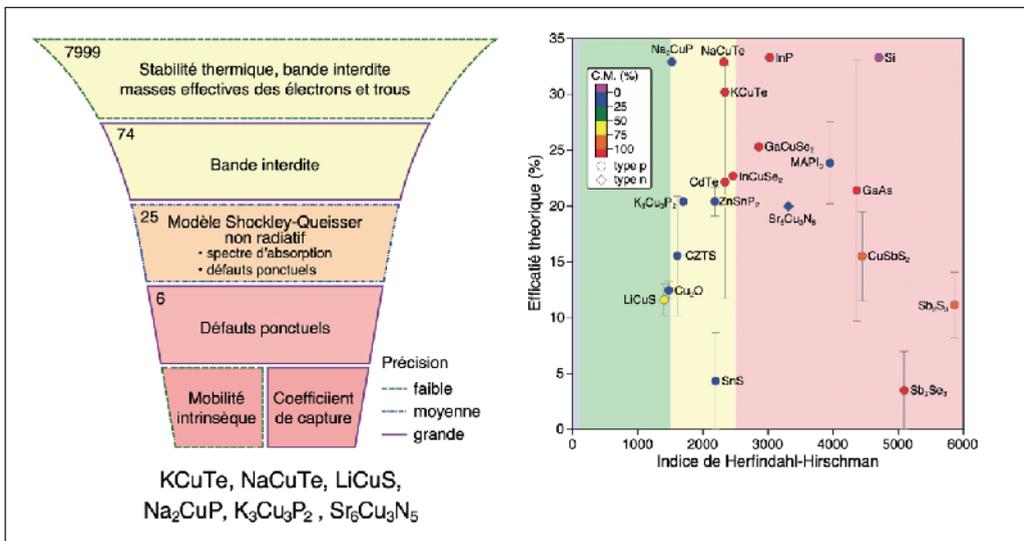


Figure 12

Comment choisir un matériau absorbeur solaire pour le photovoltaïque ?

processus avec une précision différente (voir couleur des bords de l'entonnoir dans la **Figure 12**) : le premier calcul de faible précision (effectué pour beaucoup de matériaux) permet de faire un tri grossier tandis que le calcul de grande précision (pour nettement moins de matériaux) conduit à un tri plus fin.

Suite à ce criblage, il se peut qu'un matériau ait été écarté à tort (les calculs ne sont pas toujours fiables à 100 %). Cependant, les matériaux qui sortent de l'entonnoir sont ceux pour lesquels les certitudes sont les plus fortes. Outre les critères sur les propriétés des matériaux, d'autres contraintes peuvent être prises en compte. Ainsi, dans l'étude ci-dessus, des

indicateurs liés au développement durable avaient également été pris en compte. Ces matériaux sont-ils disponibles à différents endroits du globe ? Sont-ils accessibles pour tout le monde ? Y a-t-il des difficultés à les extraire ? Y en a-t-il suffisamment sur la croûte terrestre ? Dans la partie droite de la figure, l'efficacité théorique calculée pour la conversion de la lumière en électricité est représentée pour les différents matériaux en fonction de l'indice de Herfindahl-Hirschman qui mesure la concentration du marché, c'est-à-dire du nombre d'entreprises qui produisent le matériau considéré. De surcroît, les différents matériaux ont été colorés en fonction de leur

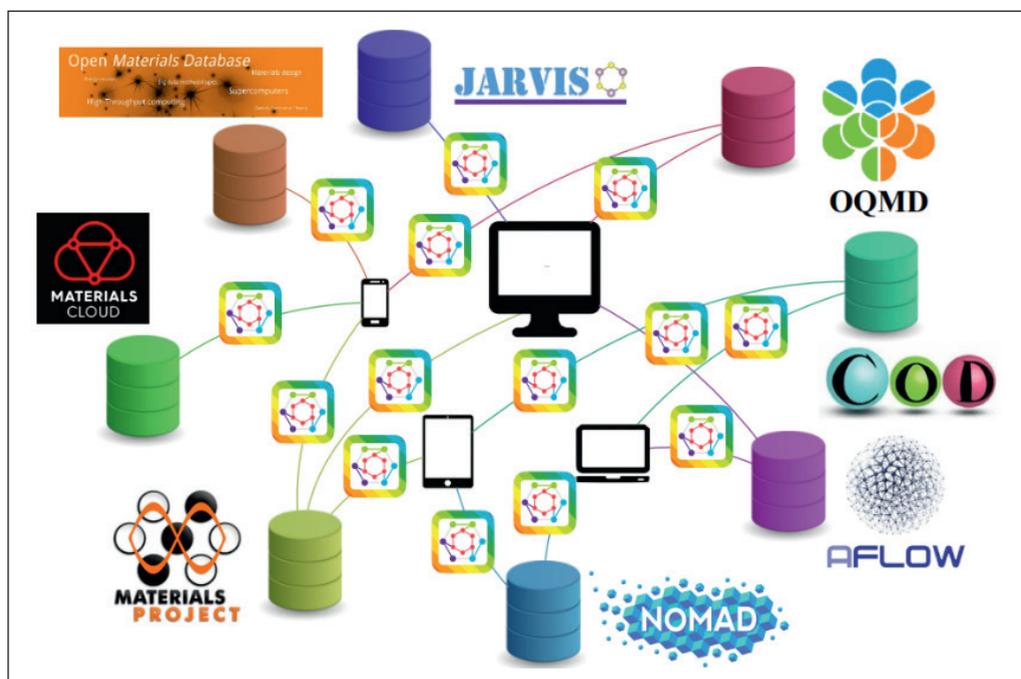


Figure 13

Interrogation des bases de données de matériaux au travers du protocole OPTIMADE.

« compagnonnage » [C.M. en %] qui indique la mesure dans laquelle les éléments qui le constituent ont été obtenus en grande partie ou entièrement en tant que sous-produit de l'extraction d'autres éléments à partir de minerais géologiques. Un matériau de faible compagnonnage est constitué d'éléments qui sont principalement exploités pour eux-mêmes et, à l'inverse, un matériau de haut compagnonnage est constitué d'éléments qui sont obtenus comme les sous-produits de l'exploitation d'autres éléments (par exemple, plus de 90 % des approvisionnements en sélénium et en tellure sont associés au cuivre). Tous les indicateurs disponibles peuvent être pris en compte lors du criblage afin de proposer à l'expérimentation les matériaux les plus pertinents.

### 3.2. Utilisation des bases de données disponibles en ligne : le consortium OPTIMADE

Tous les calculs effectués au cours du criblage ne sont pas perdus même si un matériau n'est pas retenu au bout du compte. En effet, les résultats sont stockés dans des bases de données qui peuvent être mises à disposition en ligne. Citons par exemple AFLOW, COD, JARVIS, the Materials Cloud, the Materials Project, NOMAD, ou OQMD (Figure 13). Chacune de ces bases de données ayant ses spécificités, il est intéressant de pouvoir les combiner. C'est ce que le consortium OPTIMADE s'est attaché à faire en définissant un protocole unique pour

interroger toutes ces bases de données. Cela contribue à rendre les données plus facilement « trouvables » (Findable), « accessibles » (Accessible), « interopérables » (Interoperable), « réutilisables » (Reusable) : c'est le concept des « FAIR-data » qui a pris de l'ampleur dernièrement. En effet, pouvoir obtenir le maximum de données est très important pour les modèles de *machine learning*<sup>9</sup>.

## 4 Quatrième paradigme : la science des données

Cette multiplication de bases de données de propriétés des matériaux a rendu possible l'utilisation de l'intelligence artificielle, de l'apprentissage automatique et du minage de données. Cette évolution a conduit au quatrième changement de paradigme apparu au début des années 2000 : la science des données (Figure 14).

9. Processus d'apprentissage automatique par l'intelligence artificielle.

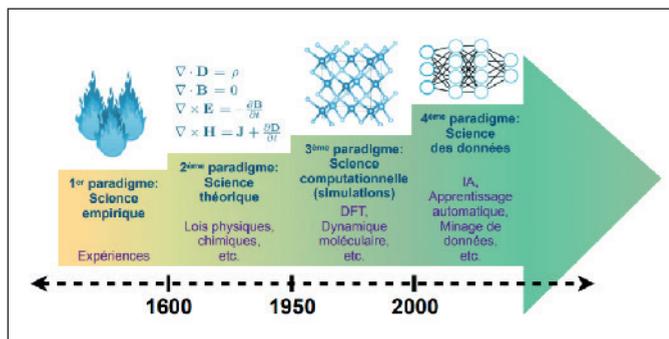


Figure 14

Frise chronologique des paradigmes – 2000 et plus.

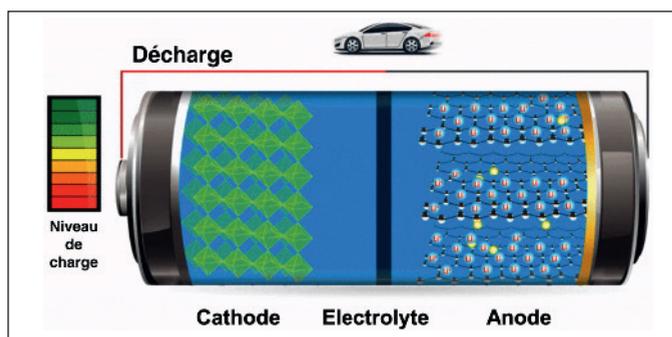


Figure 15

Schéma d'une batterie.

#### 4.1. Intelligence artificielle prédictive

En science des matériaux, les techniques de régression de l'apprentissage automatique permettent ainsi d'établir des modèles pour les relations entre le procédé, la structure, les propriétés et les performances (Figure 6). Il est ainsi possible de faire des prédictions en une fraction de seconde, ce qui constitue une accélération considérable par rapport aux calculs *ab initio* présentés précédemment.

L'apprentissage automatique facilite également la connexion entre les différentes échelles de longueurs et de temps (Figure 10). Par exemple, pour la dynamique moléculaire atomique, des potentiels décrivant les interactions entre les atomes peuvent être « appris » sur la base de calculs *ab initio* et en utilisant de l'apprentissage automatique. De même, pour passer à l'échelle supérieure, les paramètres nécessaires peuvent être appris au départ d'une série de simulations de dynamique moléculaire. L'avantage principal est d'avoir à l'échelle supérieure des calculs de précision quasi similaire à celle de l'échelle

inférieure, mais avec une vitesse nettement supérieure.

Une des utilisations récentes de cette approche a porté sur l'amélioration des matériaux pour les électrolytes des batteries Li-ion. Celles-ci consistent en une cathode<sup>10</sup>, un électrolyte<sup>11</sup> et une anode<sup>12</sup> (Figure 15). Quand la batterie se charge, les ions Li<sup>+</sup> quittent le matériau de la cathode et vont se stocker dans le matériau de l'anode. Quand elle se décharge, c'est-à-dire quand elle produit le courant électrique (par exemple pour alimenter une voiture), les ions Li<sup>+</sup> font le mouvement inverse, migrant de l'anode à la cathode. Les électrons suivent le mouvement opposé aux ions Li<sup>+</sup> tant à la charge qu'à la décharge. Le mouvement de migration des ions Li<sup>+</sup> se fait au travers de l'électrolyte.

Dans les batteries actuelles, l'électrolyte est un liquide. Celui-ci est malheureusement inflammable, ce qui a conduit à divers problèmes avec les batteries (Figure 16).

Pour éviter de tels problèmes, qui ont immobilisé des avions Boeing au sol pendant de nombreux mois en entraînant de grosses pertes économiques, une des solutions proposées est de remplacer l'électrolyte liquide par un électrolyte solide qui n'a plus ce problème d'inflammabilité (Figure 17).

10. La cathode est l'électrode positive et le siège des réactions de réduction.

11. L'électrolyte constitue la jonction entre les 2 électrodes : elle doit permettre de conduire le courant électrique et les ions.

12. L'anode est l'électrode négative et le siège des réactions d'oxydation.

Cependant, la mobilité des ions  $\text{Li}^+$  dans les solides est nettement moindre que dans les liquides, ce qui affecte l'efficacité des batteries à électrolyte solide.

La recherche actuelle vise donc à trouver des électrolytes solides avec des mobilités des ions  $\text{Li}^+$  similaires à celles dans les électrolytes liquides. L'intelligence artificielle a permis d'accélérer la dynamique moléculaire atomique tout en gardant la précision des calculs *ab initio*. La durée des simulations a donc pu être fortement allongée tout en réduisant le calcul, ce qui a permis de travailler à des températures plus réalistes dans les simulations. Les simulations ont donc fourni des prédictions nettement plus proches des résultats expérimentaux. De nouveaux électrolytes solides ont ainsi vu le jour.

#### 4.2. Intelligence artificielle générative

L'intelligence artificielle peut aussi être utilisée pour faire de la conception de matériaux dite



Figure 16

Batteries qui prennent feu : un danger venant de l'électrolyte.

Sources : Photo Gauche : <https://renew.org.au/renew-magazine/sustainable-tech/lithium-battery-fires-and-safety/> « Image : Jim Heaphy, California [CC BY-SA 3.0] », Photo Droite Adobe Stock

« inversée », à savoir d'inverser le sens des relations de la Figure 17. Il faudrait être capable de déterminer quel est le procédé à mettre en œuvre pour obtenir une propriété ? Ceci pourrait être rendu possible grâce à l'intelligence artificielle générative. Ce type d'approche vise à apprendre la structure des données d'entrée : il s'agit de trouver un espace de dimension la plus réduite possible qui permette néanmoins la description la plus complète des données. Tous les points de cet **espace latent** permettent de générer

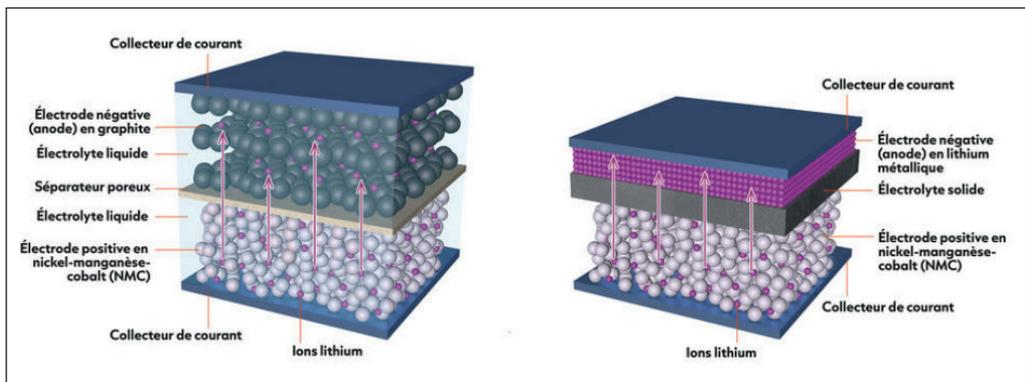


Figure 17

Le remplacement de l'électrolyte liquide par un électrolyte solide.

un nouveau contenu similaire aux données d'apprentissage mais avec un certain degré de nouveauté (plutôt que de simplement classer ou prédire les données).

Cette approche a connu un essor considérable récemment dans de nombreux autres domaines. Le plus notoire est évidemment ChatGPT. Mais, l'IA générative permet aussi de produire des visages de personnes qui n'existent pas. Au départ d'un grand nombre d'images de visages, la structure de celles-ci est encodée dans l'espace latent. Dans l'exemple de la **Figure 18**, il est représenté en deux dimensions pour rendre les choses plus compréhensibles (mais en pratique le nombre de dimensions est plus élevé). En considérant les images représentant des femmes et des hommes, il est possible

d'identifier un axe « féminité-masculinité ». En se déplaçant sur cet axe, au départ d'une image de visage (existant ou non), il est possible de générer de nouvelles images de visage dont la masculinité est augmentée. En pratique (vu que le nombre de dimensions est plus élevé), on peut aussi changer divers autres attributs tels que la longueur des cheveux, ou l'âge de la personne... Il existe divers sites web qui permettent maintenant de faire ce genre de manipulation. Des recherches actuelles visent précisément à faire la même chose en science des matériaux. Il faut trouver l'espace latent pour les matériaux et identifier les dimensions, les directions qui permettront de changer les propriétés des matériaux de façon générative. Par exemple, le matériau devrait être « plus dur », « plus bleu », « plus léger »...

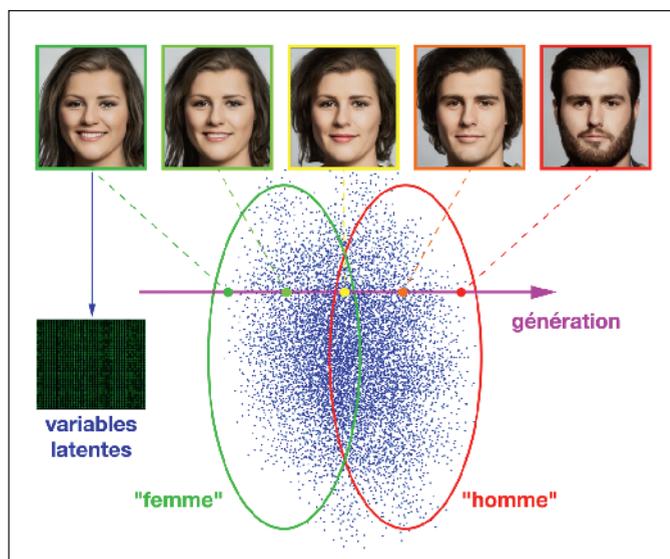


Figure 18

« Cette personne n'existe pas » – Génération de visages qui n'existent pas.

## Conclusion

Les méthodes et concepts ont évolué tout au long de l'histoire de la science des matériaux, entraînant ainsi des changements de paradigme. Au départ de la **science empirique**, des lois physiques et chimiques ont peu à peu été mises au point pour expliquer les phénomènes qui se déroulent à différentes échelles de longueur et de temps. Ce fut l'avènement de la **science théorique**. Le développement des ordinateurs a permis de numériser ces équations et donc de faire des expériences virtuelles, donnant ainsi naissance à la **science computationnelle**. Avec l'augmentation de la puissance des ordinateurs, ce type de simulations a permis de mettre en œuvre le criblage à haut débit des matériaux et de produire ainsi de nombreuses données. Leur combinaison à l'intelligence artificielle ouvre la porte à un tout nouveau paradigme : la **science des données**. Cet article a montré comment l'informatique des matériaux (simulation et intelligence artificielle) a permis (et permettra encore plus dans le futur) la découverte de nouveaux composés avec des propriétés spécifiques. Il convient cependant de souligner que les autres paradigmes ([Figure 14](#)) restent et resteront toujours d'une grande nécessité.