



OpenPNM

Faire progresser la science des matériaux pour protéger la société

L'étude des matériaux poreux est une importante discipline secondaire de la science des matériaux. Les chercheurs qui veillent sur l'avenir de la société doivent absolument en apprendre davantage sur la façon dont les gaz et les liquides traversent les matériaux perméables afin de perfectionner les batteries qui rendront les véhicules électriques plus performants, de s'assurer que les aquifères reçoivent suffisamment d'eau douce, de découvrir de nouvelles sources d'énergie ou de freiner la détérioration des bâtiments et des viaducs.

Cependant, ils ont besoin pour cela d'un cadre de calcul général qui analysera, simulera et visualisera les matériaux poreux. Chaque nouveau scientifique réinvente souvent de tels outils à partir de rien, dans son propre champ de recherche. Faute de logiciel de source ouverte avec lequel il pourrait étudier les substances perméables, il perd donc un temps précieux à concevoir, écrire et déboguer des logiciels, avec les coûts et les efforts supplémentaires que cela suppose pour chaque projet. Un temps qu'en d'autres circonstances il aurait pu consacrer à de la recherche de qualité.

Résoudre les problèmes au lieu de créer des outils

Éviter au maximum ces travaux à répétition est ce qu'essaie de faire **OpenPNM**, cadriciel rédigé en Python qui modélise les matériaux poreux en mettant à contribution une multitude de chercheurs qui maîtrisent bien les langages de programmation populaires et en exploitant les multiples logiciels de calcul, d'analyse et de visualisation existants.

Les chercheurs consacreront plus de temps à résoudre celui-ci qu'à imaginer de nouveaux cadriciels.

L'idée de bâtir quelque chose à partir de code existant présente d'autres avantages : beaucoup de chercheurs maintiennent, corrigent et perfectionnent OpenPNM pour s'assurer que les modèles computationnels intègrent la meilleure version du code. D'autre part, les chercheurs qui connaissent déjà Python, un langage de programmation courant, peuvent aisément adopter les méthodes d'OpenPNM et les adapter selon leurs besoins. Enfin, puisqu'on peut modifier le logiciel pour l'utiliser avec de nouveaux matériaux, des modèles des fluides et des structures en fonction du problème à l'étude, les chercheurs consacreront plus de temps à résoudre celui-ci qu'à imaginer de nouveaux cadriciels.

Évolution du logiciel

Financé dans le cadre du programme Logiciels de recherche de CANARIE, OpenPNM a d'abord été développé et utilisé pour vérifier l'efficacité des batteries destinées aux véhicules électriques. Depuis, il a trouvé d'autres applications dans une foule de domaines comme la prospection pétrolière, la fabrication de piles à combustible à hydrogène et les usines de dessalement.

OpenPNM a été créé par une équipe de l'Université de Waterloo, qui l'a conçu pour résoudre aisément les problèmes associés à une masse volumineuse de données. C'est pourquoi le logiciel reproduit si bien l'écoulement des liquides et des gaz dans un système complet alors que les programmes de simulation usuels ne reproduisent qu'une fraction infime du matériau.

Comblant une sérieuse lacune en science des matériaux

OpenPNM répond à un besoin criant des spécialistes en science des matériaux en leur proposant un cadriciel de source ouverte fort bien

développé et adaptable pour étudier les matériaux poreux. L'entreprise montréalaise DragonFly s'en sert déjà comme outil de visualisation en tomographie pour la société ZEISS, géant mondial de l'instrumentation. Puisque bon nombre des progrès techniques découlent d'une meilleure connaissance, d'une fabrication plus facile et d'un plus grand perfectionnement des matériaux poreux – songeons à des batteries plus puissantes ou à des filtres plus efficaces pour l'eau, OpenPNM concourt directement à accélérer la recherche dans maints domaines d'une importance cruciale pour les Canadiens.

Plateforme : OpenPNM

Description	Projet de source ouverte, OpenPNM propose à ceux qui étudient les matériaux poreux un cadriciel complet en mesure de simuler de nombreux types de réseaux de pores.
Contributeu(s)	Université de Waterloo
Champ de recherche	Structure et propriétés des matériaux, essais sur les matériaux
Autorise la poursuite de projets distincts	Oui
Licence d'exploitation du logiciel	Licence du MIT
En savoir plus	https://science.canarie.ca/res/101