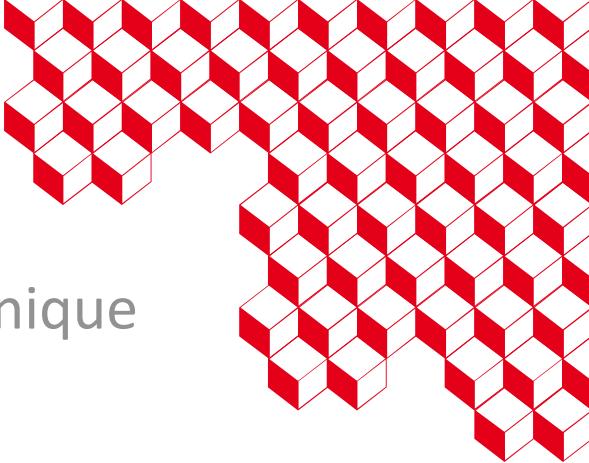




Séminaire L'IA en ingénierie mécanique
4 juin 2025 - Orsay



Métallurgie numérique : Exemple d'application pour le développement de matériaux pour l'aéronautique

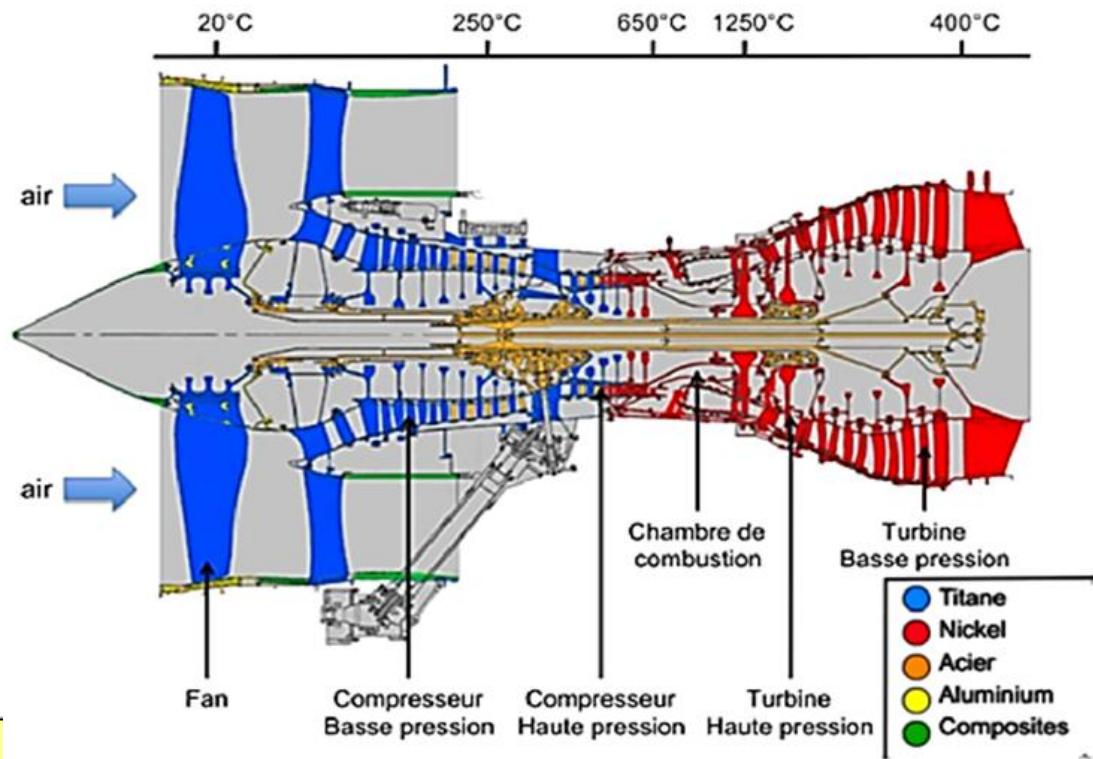
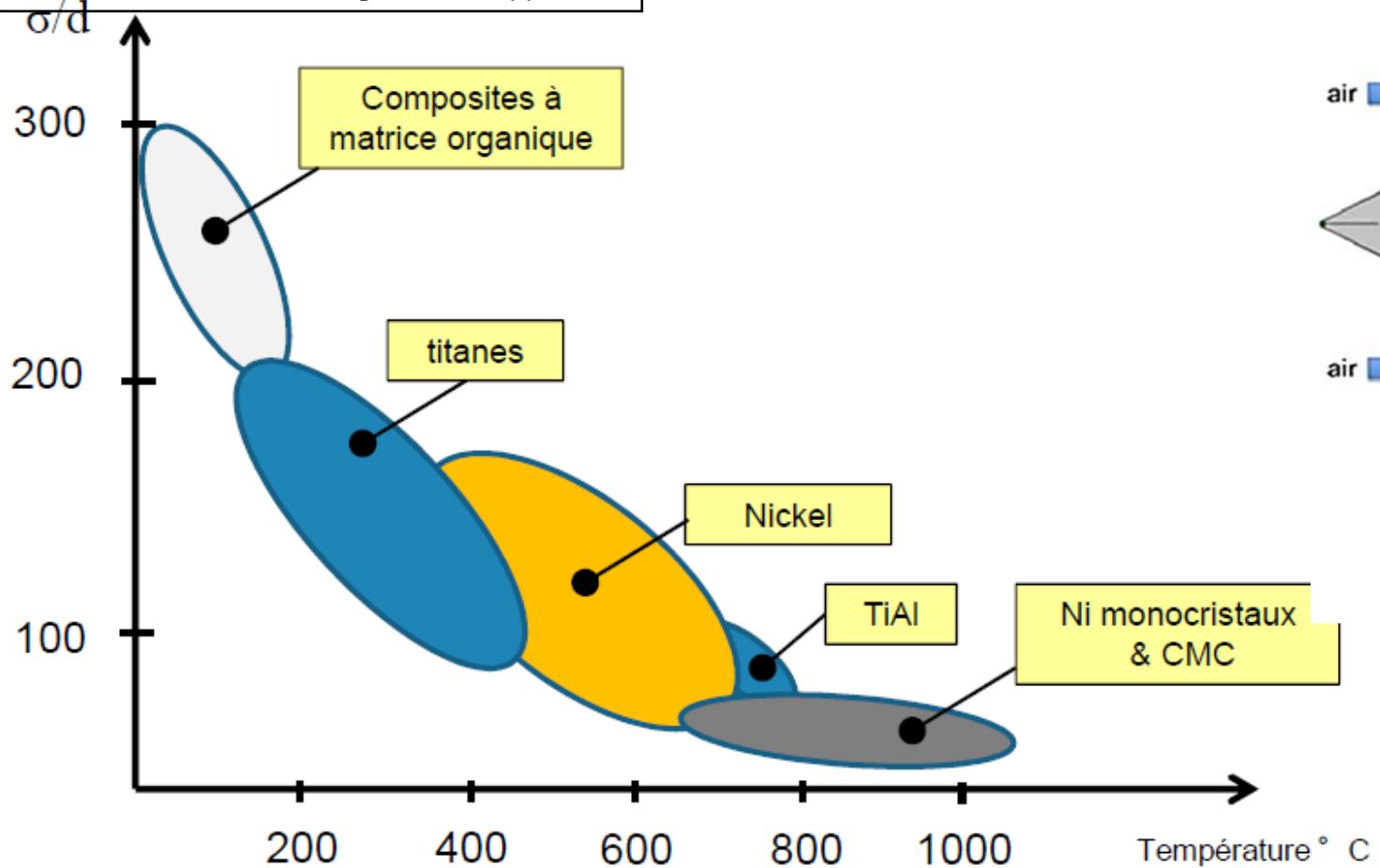
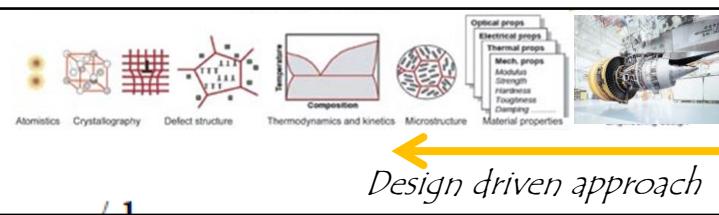
Clara DESGRANGES

CEA-ISAS/DRMP/S2CM

clara.desgranges@cea.fr

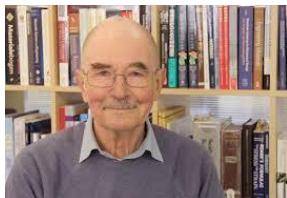
Co-workers : Edern Menou, J. Rame - Safran-Tech
G. Ramstein, F. Tancret - Nantes University

Choix matériaux multi-critères = Compromis

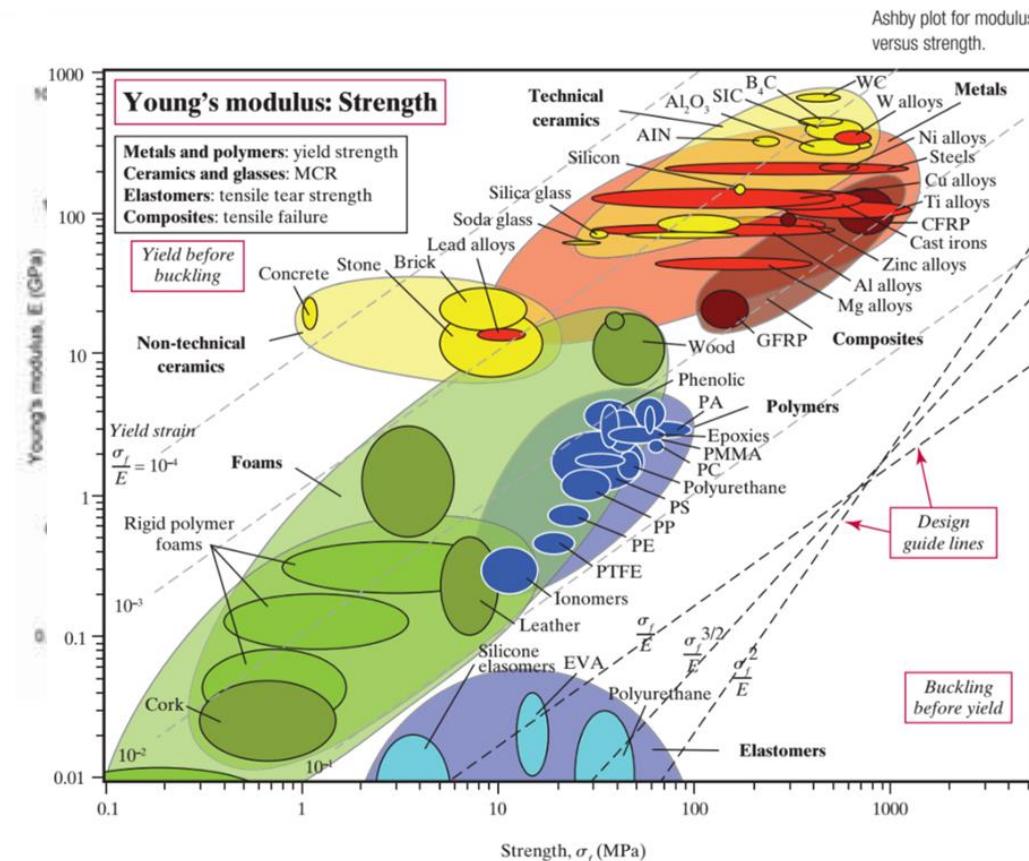
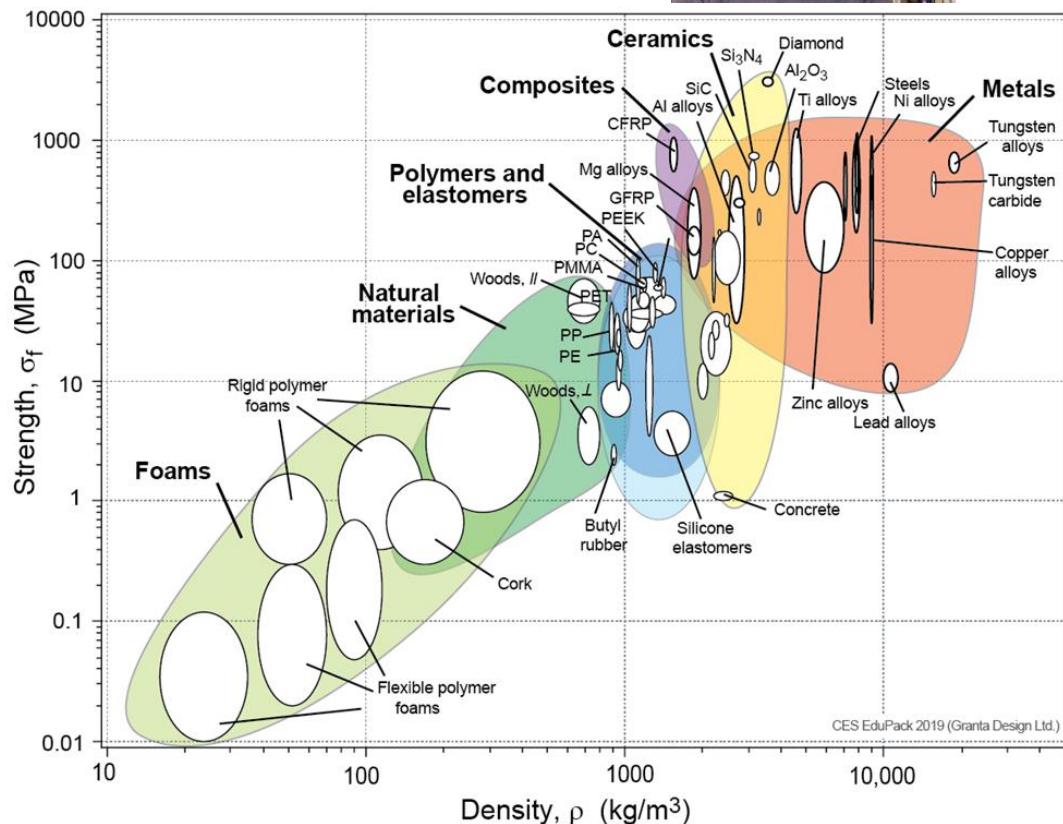
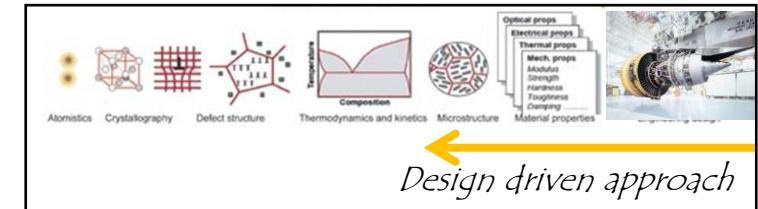


Cartes de performances des matériaux

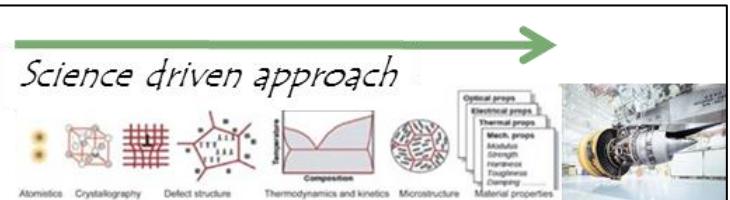
University of Cambridge, M. Ashby → **GRANTA** MATERIAL INTELLIGENCE → **Ansys**



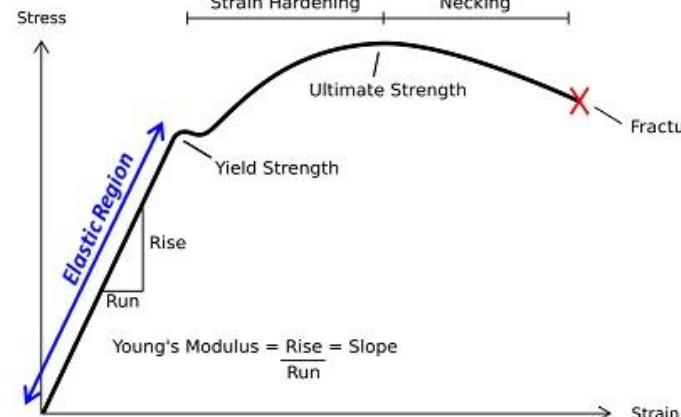
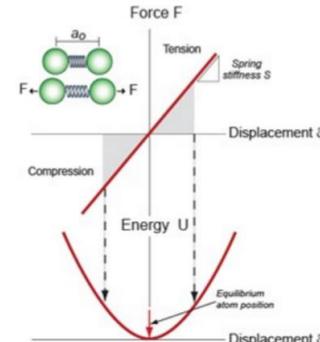
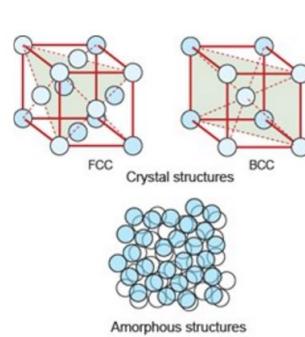
<https://www.grantadesign.com/>



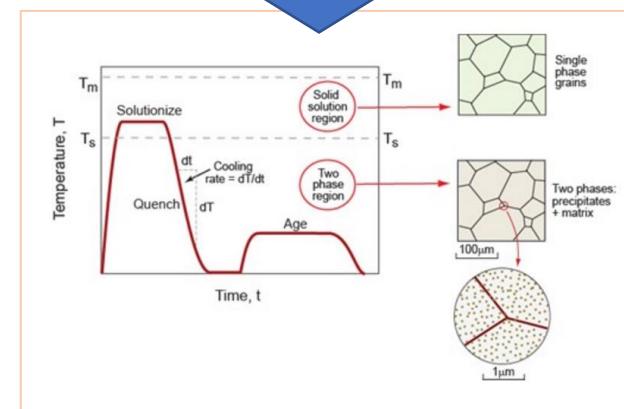
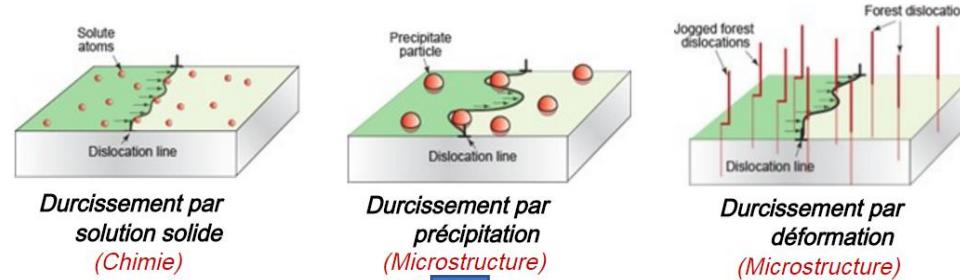
Origines des différentes propriétés



Densité : Masse atomique et organisation des atomes
Rigidité : Liens interatomiques et organisation des atomes



Métaux : Mécanisme de durcissement – épingleage de dislocations



Ni-base Superalloys

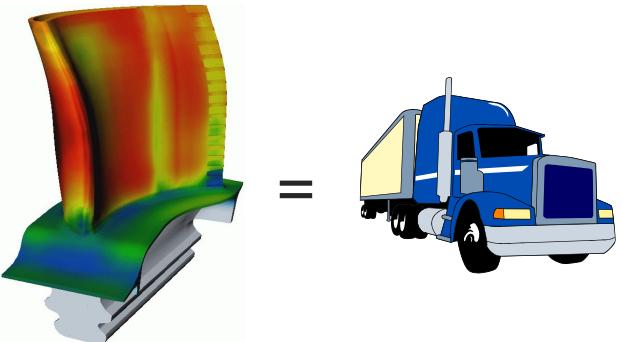
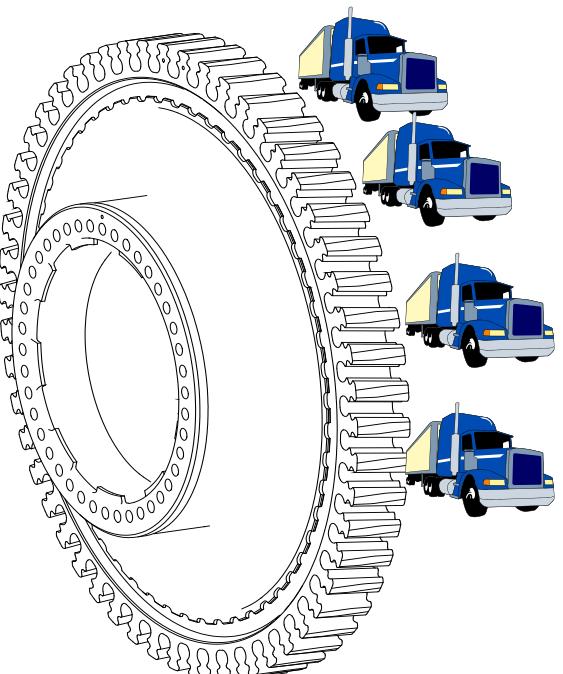
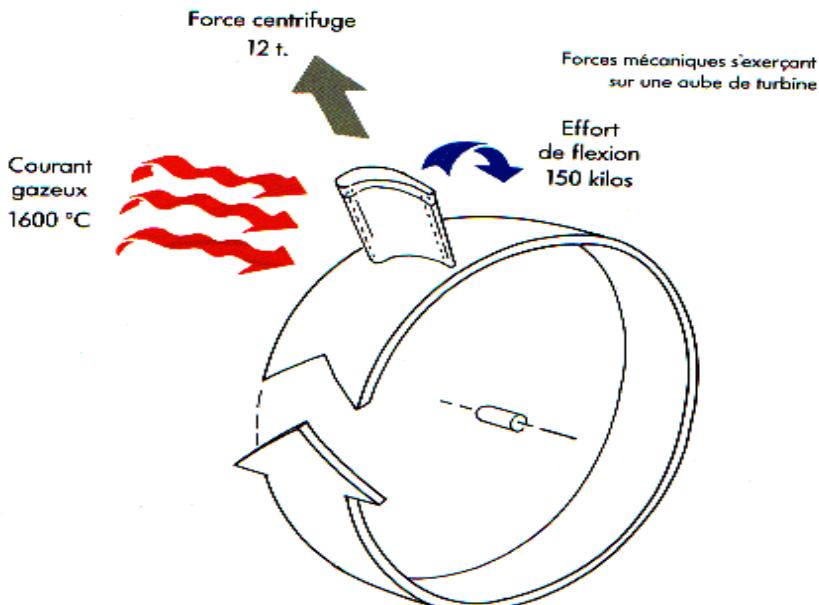
Very high thermomechanical solicitations in service

Température 450 et 700°C

Contrainte mécanique

Alésage : $\sigma_t \sim 1100$ Mpa

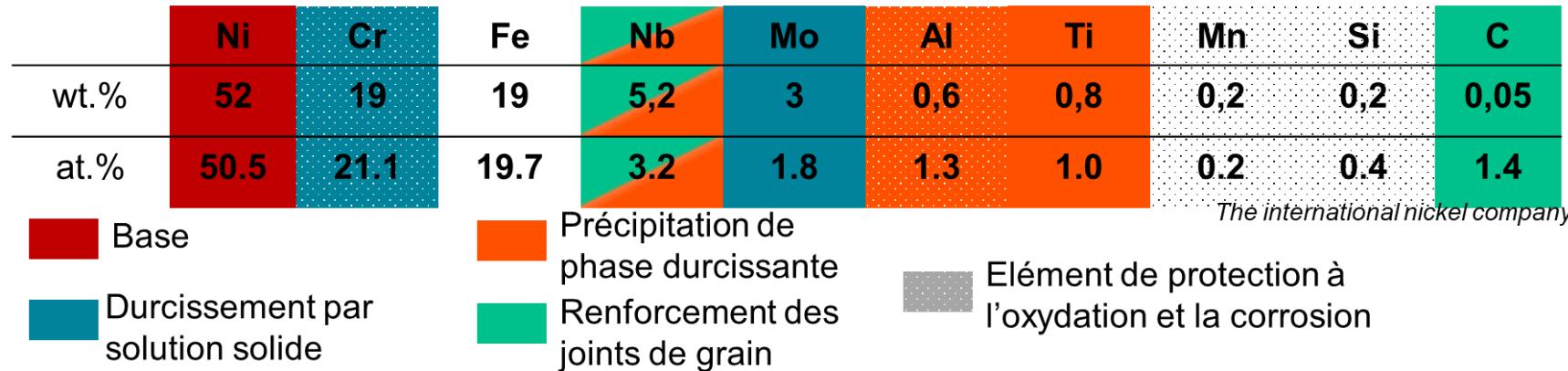
Fond d'alvéole : $\sigma_{loc} \sim 1900$ MPa



Each blade could be seen
as a 22 tonnes truck

Superalliages base Nickel

Matériaux : Alliage IN718



Microstructure :

γ : Ni, matrice cubique face centrée

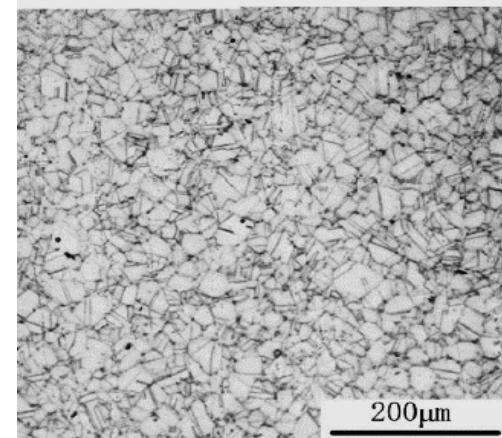
γ' : $\text{Ni}_3(\text{Al}, \text{Ti})$, cubique simple

γ'' : Ni_3Nb , tétragonale

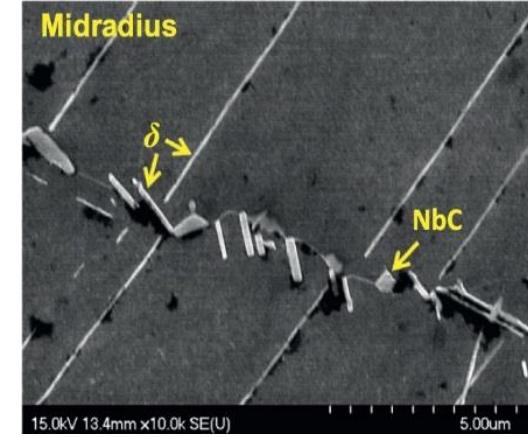
δ : Ni_3Nb , orthorombique

MC : NbC

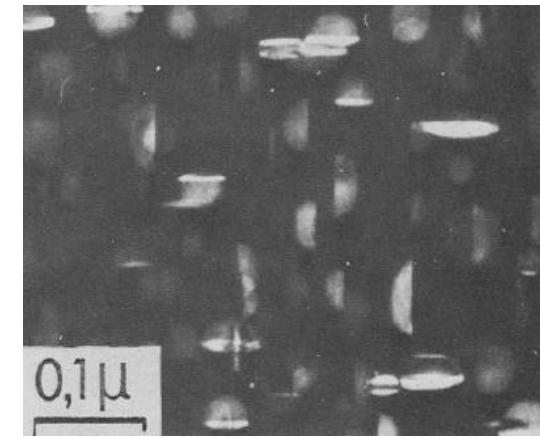
Autres : Laves, M_6C , η



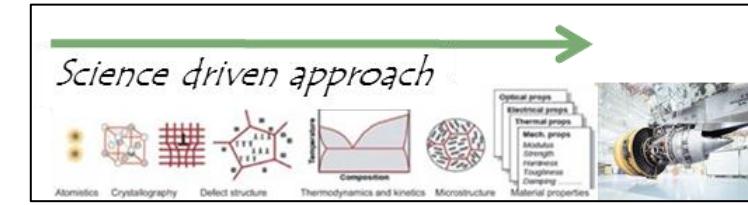
Optique, Forgé, Wang et al. (2010)



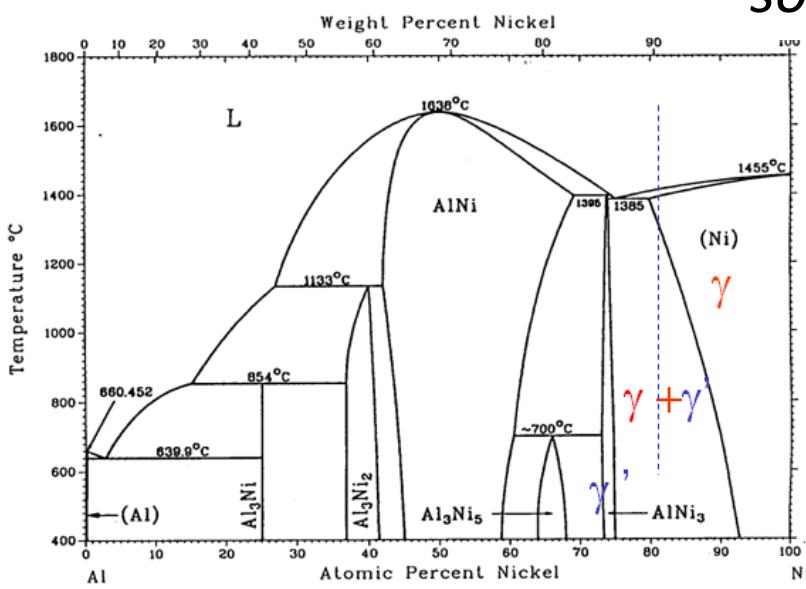
MEB, Chamanfar et al. (2013)



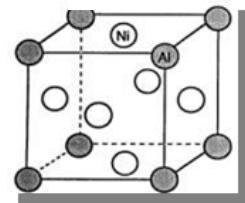
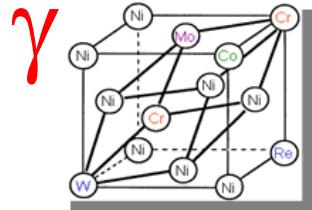
MET, Cozar et Pineau (1973)



Strengthening γ' phase Ni₃(Al,Ti) in austenitic γ phase (Ni Cr Co...)



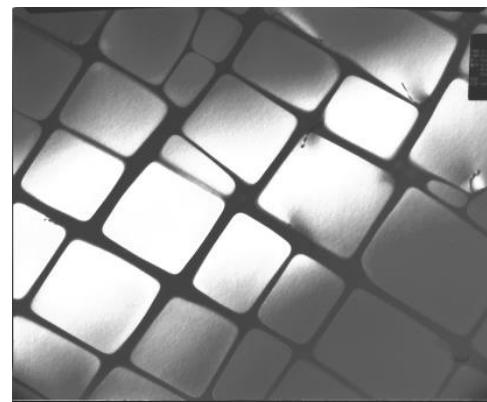
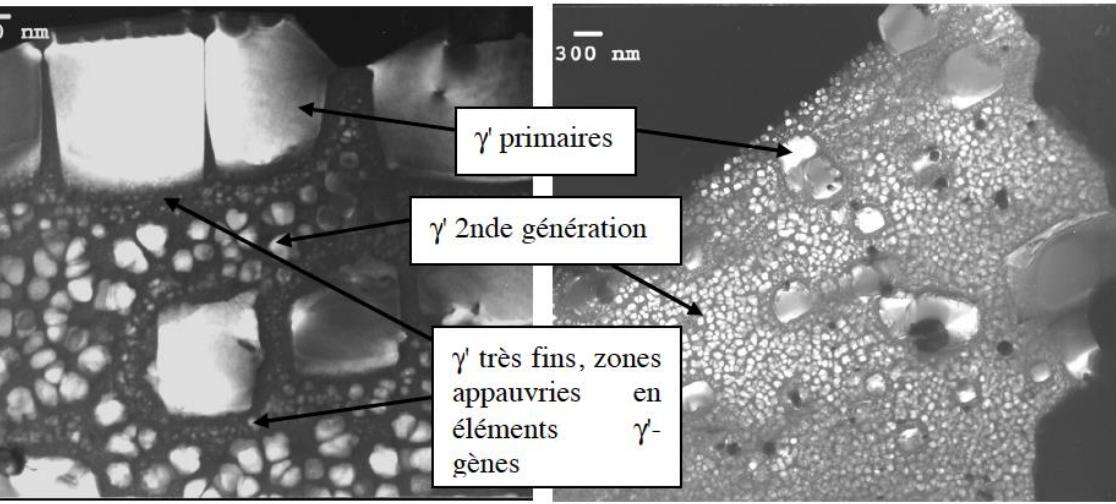
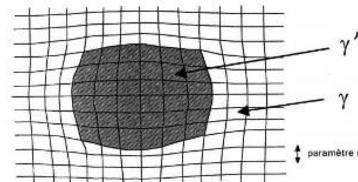
*Disordered
solid solution*



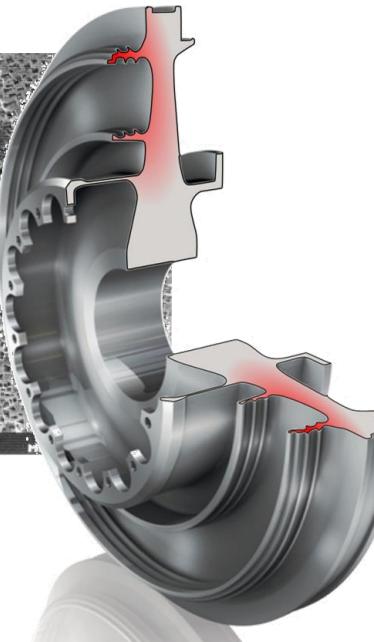
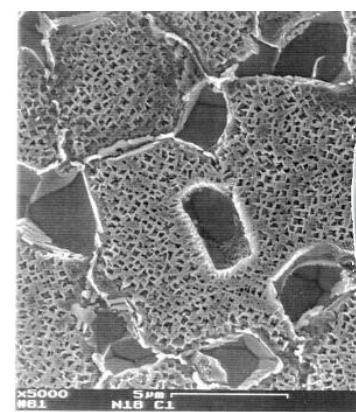
Al

Ni

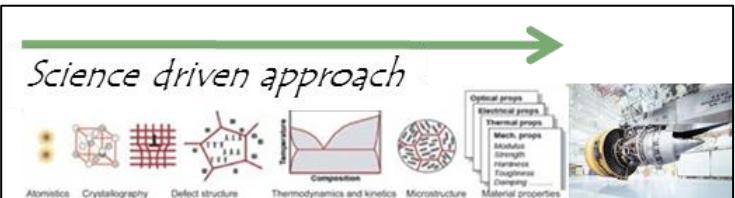
Ordered phase



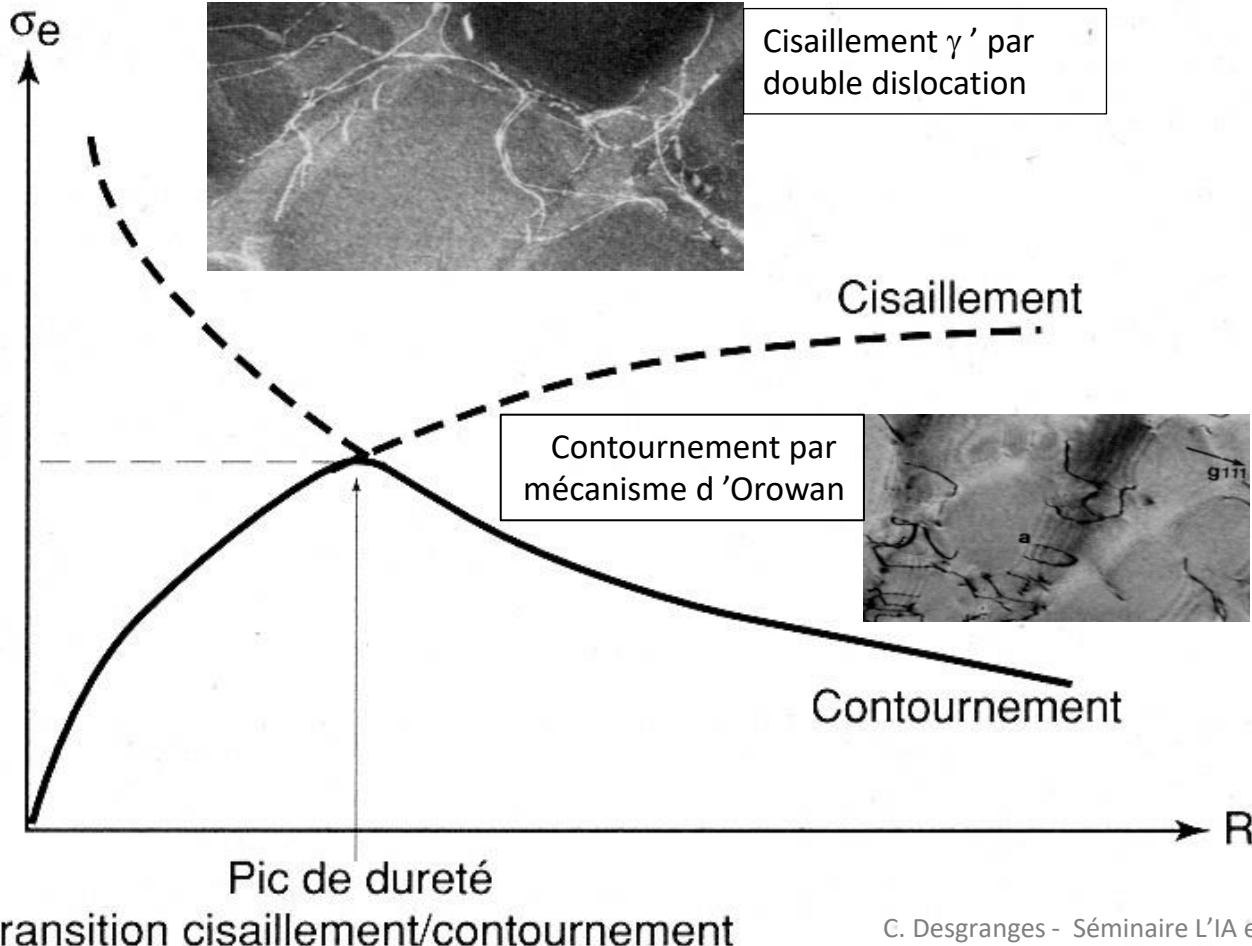
500 nm



Lien microstructure- propriétés mécanique



Mécanismes de durcissement par les précipités cisaillement ou contournement



Un alliage dont la fraction volumique de phase précipitée f est une constante

En fonction de R on calcule l'augmentation de cission critique résolue correspondant :

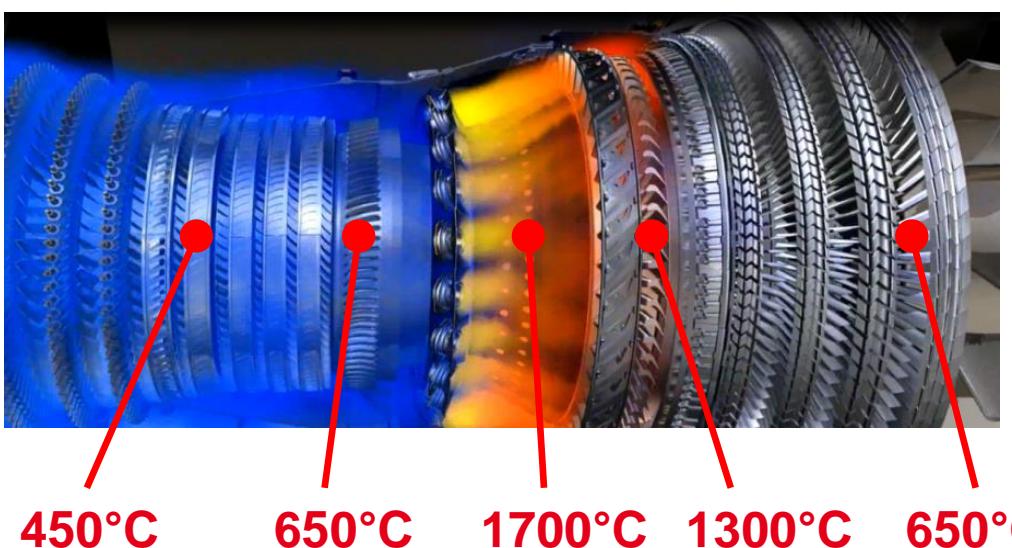
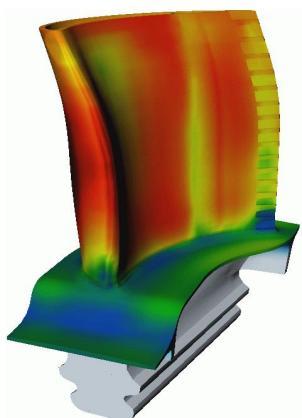
- au cisaillement des précipités (varie en $1/R$)
- au contournement des précipités (varie en $R^{1/2}$)

⇒ en fonction de R , c'est le mécanisme correspondant à la plus faible augmentation de CRSS qui fonctionnera

Conception numérique d'alliages

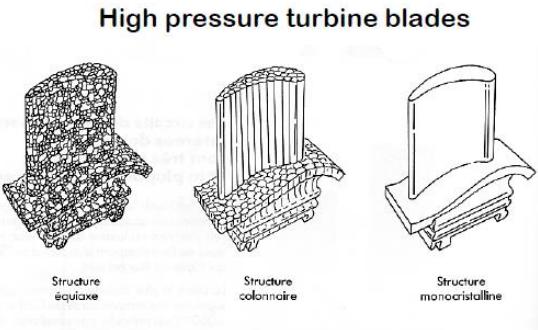
Contexte

Exemple d'application : superalliage pour aube SX

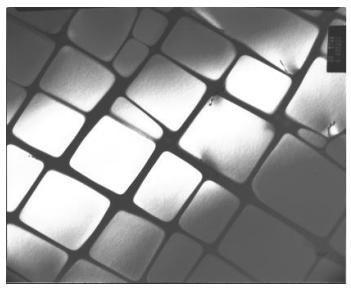


Système complexe : Aubes mono-crystallines revêtues Barrière Thermique (BT)

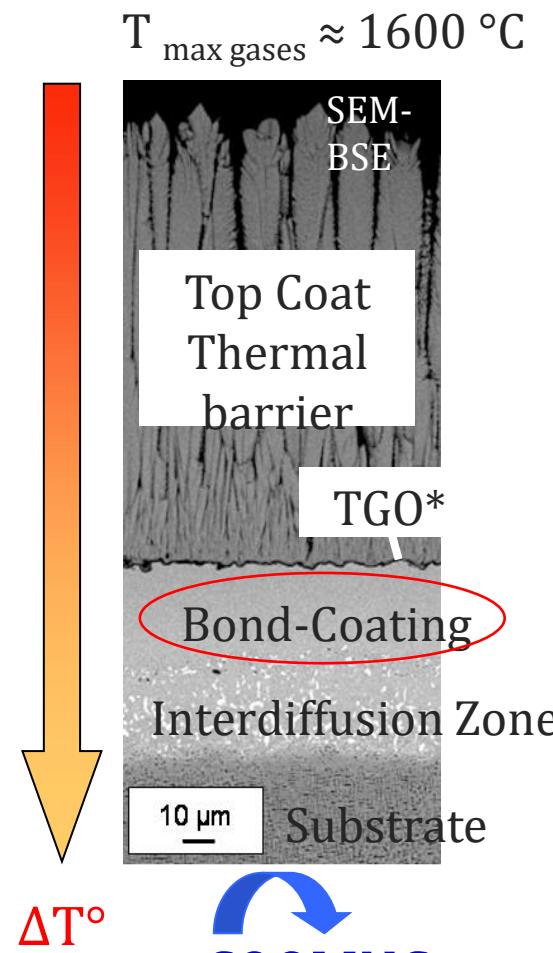
Alliage SX de Fonderie



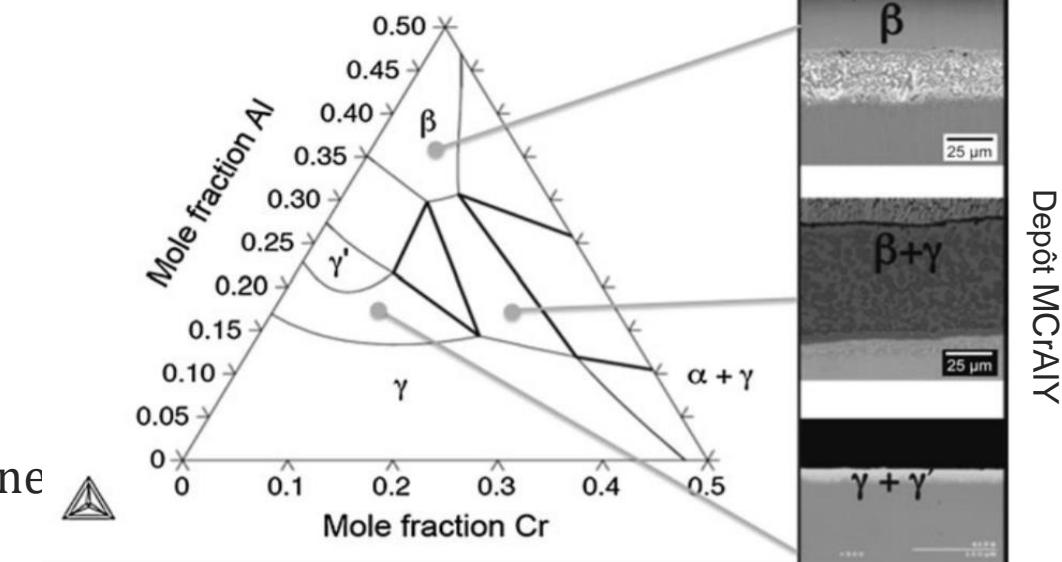
Fluage
Fatigue
Oxydation cyclique
Corrosion



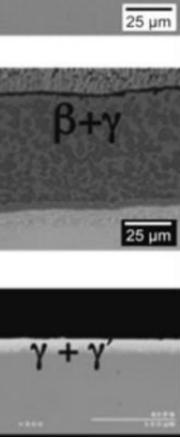
500 nm



Les différents types de sous-couche
(Bond Coating)



Aluminisation
(APVS)



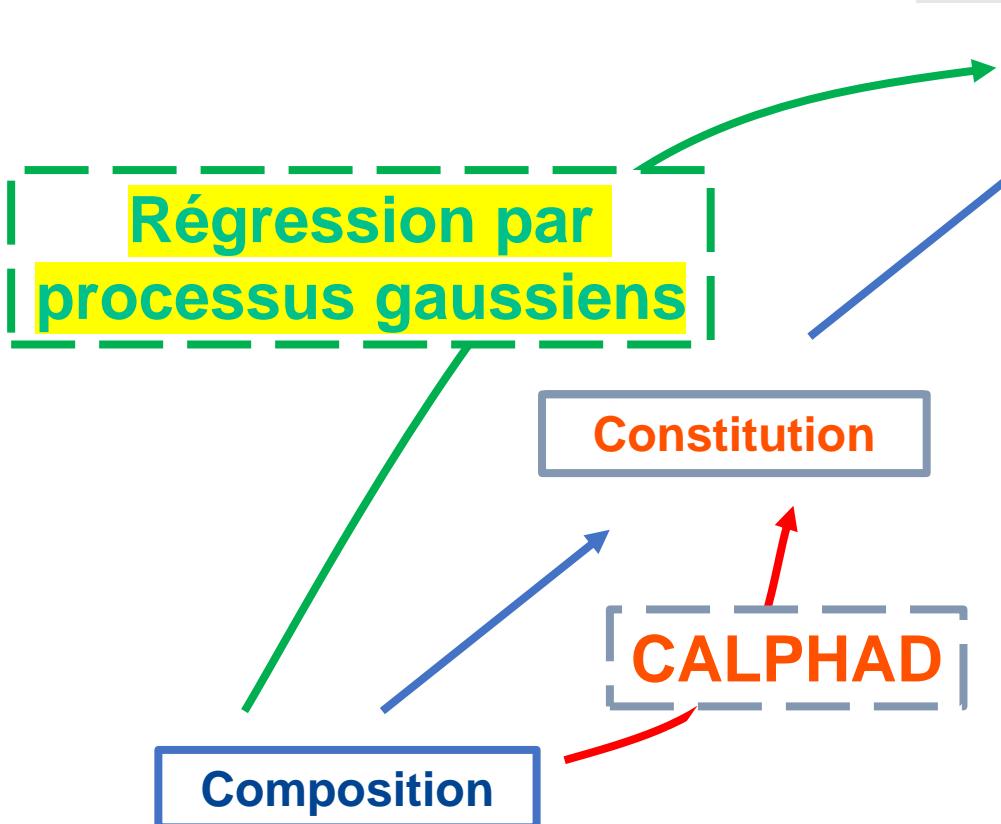
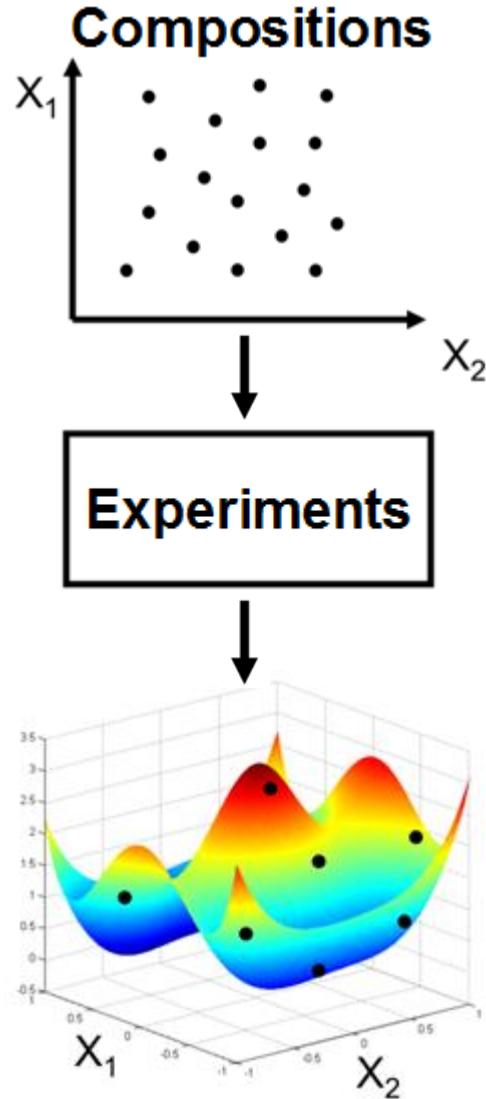
Dépot MCrAlY



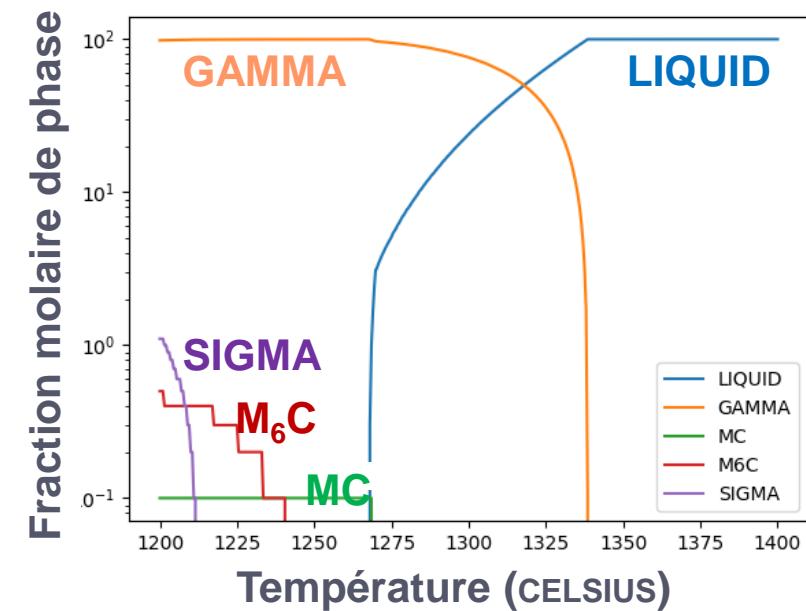
Pt Dépot
electrolytique

hydrogen	1	H	1.0079
boron	3	Be	9.0122
Li	4		
6.941			
sodium	11	Mg	24.306
Na	12		
22.990			
potassium	19	calcium	
K	20	Sc	
39.098		Ti	
Rb	21	V	
85.468		Cr	
Sr	22	Mn	
87.62		Fe	
Cs	23	Co	
132.91		Ni	
Ba	24	Cu	
137.33		Zn	
Fr	25	Ga	
223		Ge	
Ra	26	As	
129		Se	
Lr	27	Br	
103		Kr	
Rf	28	In	
104		Sn	
Db	29	Sb	
105		Te	
Sg	30	I	
106		Xe	
Bh	31	Pt	
107		Au	
Hs	32	Hg	
108		Tl	
Mt	33	Pb	
109		Bi	
Uun	34	Po	
110		At	
Uuu	35	Rn	
111			
Uub	36		
112			
Uuq	37		
114			
	38		
	39		
	40		
	41		
	42		
	43		
	44		
	45		
	46		
	47		
	48		
	49		
	50		
	51		
	52		
	53		
	54		
	55		
	56		
	57-70		
	71		
	72		
	73		
	74		
	75		
	76		
	77		
	78		
	79		
	80		
	81		
	82		
	83		
	84		
	85		
	86		
	87		
	88		
	89-102		
	103		
	104		
	105		
	106		
	107		
	108		
	109		
	110		
	111		
	112		
	113		
	114		
	115		
	116		
	117		
	118		
	119		
	120		
	121		
	122		
	123		
	124		
	125		
	126		
	127		
	128		
	129		
	130		
	131		
	132		
	133		
	134		
	135		
	136		
	137		
	138		
	139		
	140		
	141		
	142		
	143		
	144		
	145		
	146		
	147		
	148		
	149		
	150		
	151		
	152		
	153		
	154		
	155		
	156		
	157		
	158		
	159		
	160		
	161		
	162		
	163		
	164		
	165		
	166		
	167		
	168		
	169		
	170		
	171		
	172		
	173		
	174		
	175		
	176		
	177		
	178		
	179		
	180		
	181		
	182		
	183		
	184		
	185		
	186		
	187		
	188		
	189		
	190		
	191		
	192		
	193		
	194		
	195		
	196		
	197		
	198		
	199		
	200		
	201		
	202		
	203		
	204		
	205		
	206		
	207		
	208		
	209		
	210		
	211		
	212		
	213		
	214		
	215		
	216		
	217		
	218		
	219		
	220		
	221		
	222		
	223		
	224		
	225		
	226		
	227		
	228		
	229		
	230		
	231		
	232		
	233		
	234		
	235		
	236		
	237		
	238		
	239		
	240		
	241		
	242		
	243		
	244		
	245		
	246		
	247		
	248		
	249		
	250		
	251		
	252		
	253		
	254		
	255		
	256		
	257		
	258		
	259		
	260		
	261		
	262		
	263		
	264		
	265		
	266		
	267		
	268		
	269		
	270		
	271		
	272		
	273		
	274		
	275		
	276		
	277		
	278		
	279		
	280		
	281		
	282		
	283		
	284		
	285		
	286		
	287		
	288		
	289		
	290		
	291		
	292		
	293		
	294		
	295		
	296		
	297		
	298		
	299		
	300		
	301		
	302		
	303		
	304		
	305		
	306		
	307		
	308		
	309		
	310		
	311		
	312		
	313		
	314		
	315		
	316		
	317		
	318		
	319		
	320		
	321		
	322		
	323		
	324		
	325		
	326		
	327		
	328		
	329		
	330		
	331		
	332		
	333		
	334		
	335		
	336		
	337		
	338		
	339		
	340		
	341		
	342		
	343		
	344		
	345		
	346		
	347		
	348		
	349		
	350		
	351		
	352		
	353		
	354		
	355		
	356		
	357		
	358		
	359		
	360		
	361		
	362		
	363		
	364		
	365		
	366		
	367		
	368		
	369		
	370		
	371		
	372		
	373		
	374		
	375		
	376		
	377		
	378		
	379		
	380		
	381		
	382		
	383		
	384		
	385		
	386		
	387		
	388		
	389		
	390		
	391		
	392		
	393		
	394		
	395		
	396		
	397		
	398		
	399		
	400		
	401		
	402		
	403		
	404		
	405		
	406		
	407		
	408		
	409		
	410		
	411		
	412		
	413		
	414		
	415		
	416		
	417		
	418		
	419		
	420		
	421		
	422		
	423		
	424		
	425		
	426		
	427		
	428		
	429		
	430		
	431		
	432		
	433		
	434		
	435		
	436		
	437		
	438		
	439		
	440		
	441		
	442		
	443		
	444		
	445		
	446		
	447		
	448		
	449		
	450		
	451		
	452		
	453		
	454		
	455		
	456		
	457		
	458		
	459		
	460		
	461		
	462		
	463		
	464		
	465		
	466		
	467		

Métallurgie combinatoire : la stratégie de conception



CALPHAD ne permet la prédition que de la constitution !



Construction de la base de données “fluage”

E. Menou J. Rame, C. Desgranges, G. Ramstein, F. Tancret *Computational Materials Science* 170 (2019) 109194



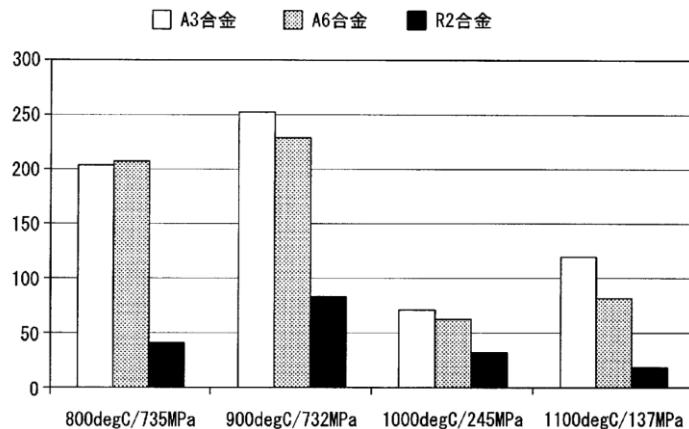
Étude bibliographique de ~ 500 brevets

Données extraites de ~ 300 brevets

Source mineure : littérature scientifique et technique

1 mois de compilation à temps plein

La base de données contient ~ 2000 lignes et inclut ~ 600 alliages du système Ni-Al-C-Co-Cr-Hf-Mo-Nb-Re-Ru-Ta-Ti-W + conditions d'essais (température et contrainte initiale)



№ сплава	Содержание элементов, мас.%									
	Al	Cr	W	Mo	Ti	C	Sn	Zr	La	Ni
I	7,8	5,0	4,0	3,0	0,8	0,001	-	0,5	0,016	Osn
II	8,4	5,7	3,3	3,5	1,2	0,01	-	0,24	0,10	Osn
III	9,0	6,5	2,7	4,0	1,5	0,02	-	0,05	0,25	Osn
Прототип	8,5	5,7	3,2	3,5	1,2	0,02	0,05	0,25	-	Osn

Свойства предлагаемого сплава с различным соотношением компонентов и сплава-прототипа, полученных по одной и той же технологической схеме, приведены в таблице 2.

Свойства	I	II	III	Прототип
Привес образцов при окислении на воздухе за 100 ч при температуре 1200°C, г/м ²	15-18	12-15	11-15	30-35
Время до разрушения при 1000°C и напряжении 150 МПа, ч	224	370	257	127
Время до разрушения при 1100°C и напряжении 100 МПа, ч	130	150	138	94
Плотность, кг/м ³	7,934	7,910	7,860	7,936



Validation des bases de données

Processus Gaussiens

La prédictivité des modèles est déterminée par **validation croisée k fois**

e.g. validation croisée 2 fois

Training set

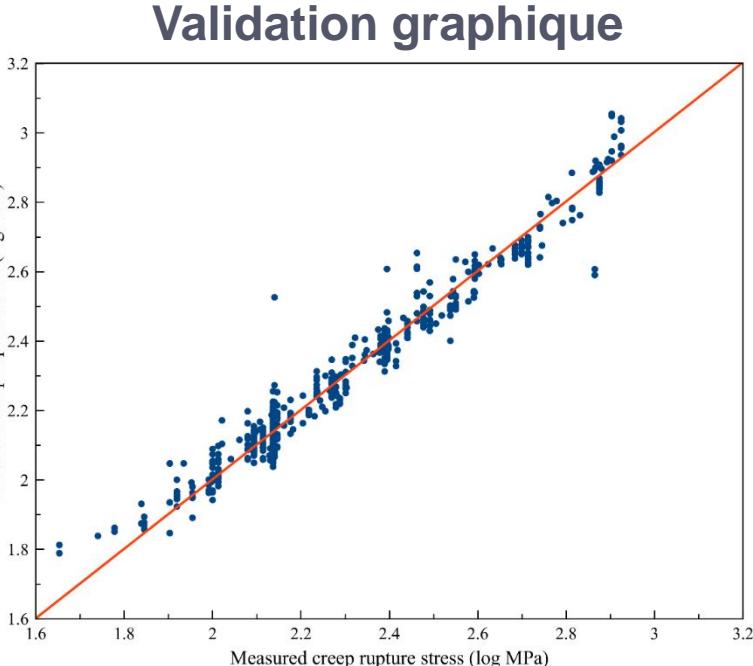
Test set

ID	LAB/HAB (Degrees)	TEST CONDITION	RUPTURE LIFE HRS	ELONG., %	RA, %	Time to 1%	Time to 2%
257-5	8.7	1800P/25.0 ksi	712.5	40.4	21.5	262.1	349.1
270-4	10.1	1800P/25.0 ksi	739.7	40.8	35.0	283.6	377.5
270-8	10.0	1800P/25.0 ksi	810.8	39.6	49.0	325.8	423.7
260-1	11.9	1800P/25.0 ksi	604.8	19.6	17.4	239.9	321.3
260-5	11.9	1800P/25.0 ksi	609.1	11.9	14.9	266.9	366.2
275-7	13.8	1800P/25.0 ksi	551.6	10.3	8.9	264.9	357.5
275-3	13.8	1800P/25.0 ksi	548.5	10.2	11.5	245.2	332.8
265-1	18.1	1800P/25.0 ksi	1,074.0	0.9	1.0	—	—
265-5	18.1	1800P/25.0 ksi	697.2	47.9	92.1	248.3	340.6

Détermination des paramètres du modèle

Évaluation de la prédictivité \propto différence entre valeurs réelles et prédictées

ID	SX-long	1800P/36.0 ksi	143.0	35.7	48.1	48.0	66.3
K720	SX-long	1800P/36.0 ksi	138.3	46.1	47.0	42.9	61.0
264-2	4.7	1800P/36.0 ksi	136.4	40.3	47.5	38.5	56.2
264-4	4.7	1800P/36.0 ksi	141.5	49.0	48.8	43.1	60.8
258-4	7.7	1800P/36.0 ksi	141.5	22.9	24.4	42.5	62.0
258-8	7.7	1800P/36.0 ksi	141.3	28.8	29.8	42.5	60.6
270-1	10.0	1800P/36.0 ksi	133.4	34.4	47.7	43.4	61.5
270-5	10.0	1800P/36.0 ksi	152.5	45.1	45.0	50.1	70.0
265-6	11.9	1800P/36.0 ksi	141.1	26.7	33.9	34.7	52.0
272-6	13.8	1800P/36.0 ksi	105.4	17.9	46.5	64.4	64.4
272-3	14.4	1800P/36.0 ksi	117.6	14.7	33.8	42.5	60.3
272-7	14.4	1800P/36.0 ksi	123.7	10.2	14.2	54.0	73.3



Validation analytique

Observation

$$Q^2 = 1 - \frac{\sum_i (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{\sum_i (\bar{Y} - \hat{Y}_i)^2}$$

Coefficient de prédictivité

Valeur moyenne des observations

prédition

Autres bases de données

Base de données	# lignes	# alliages	
t_r	1963	612	
t_l	554	141	
Fluage	292	58	
t_2	593	184	
DR	385	102	
RAR	214	116	
R_m (SX)	2249	403	
R_m (SX + PX)	135	39	
Traction	2096	299	
R_e (SX)	99	22	
R_e (SX + PX)	95	13	
Masse volumique	210	189	
Désaccord paramétrique	79	72	
Oxydation	Δm (isotherme)	58	35
	Δm (cyclique)	146	104
Transformations	Solvus γ'	57	54
	Solidus	29	28
Coefficient de dilatation	—	—	

Recherche de superalliages pour aubes de turbines

E. Menou J. Rame, C. Desgranges, G. Ramstein, F. Tancret *Computational Materials Science* 170 (2019) 109194

Espace de 300 000 000 alliages potentiels

	Al	Co	Cr	Hf	Mo	Nb	Re	Ru	Ta	Ti	W	C
min.	4	0	4	0	0	0	0	0	5	0	0	.02
max.	8	14	15	0.5	3	3	6	2	15	3	10	



Caractéristiques calculées :

Critères

- densité (loi des mélanges type Hull) $< 9.05 \text{ g.cm}^{-3}$.
- coulabilité (critère de Konter pour la résistance au *freckles*)

$$\frac{1.5w_{\text{Hf}} + 0.5w_{\text{Mo}} + w_{\text{Ta}} - 0.5w_{\text{Ti}}}{1.2w_{\text{Re}} + w_{\text{W}}} \geq 0.7$$

CALPHAD

- désaccord paramétrique (coefficients de Vegard) $\delta = 2 \frac{a_{\gamma'} - a_{\gamma}}{a_{\gamma'} + a_{\gamma}}$
- contrainte de rupture par fluage (*Krigeage*) } à trois températures de service

950 °C/1100 h, 1050 °C/110 h, 1050 °C/550 h and 1200 °C/510 h.

300, 200, 150 and 55 MPa

CALPHAD

- résistance à la corrosion $(\text{Al}, \text{Cr})_{\gamma}$ à 1200°C
- microstructure (γ , γ' et < 5% mol. phases TCP)

Résultats de la recherche

E. Menou J. Rame, C. Desgranges, G. Ramstein, F. Tancret *Computational Materials Science* 170 (2019) 109194

50 jours d'évaluation (station 2 x Xeon)
50,000,000 équilibres CALPHAD calculés

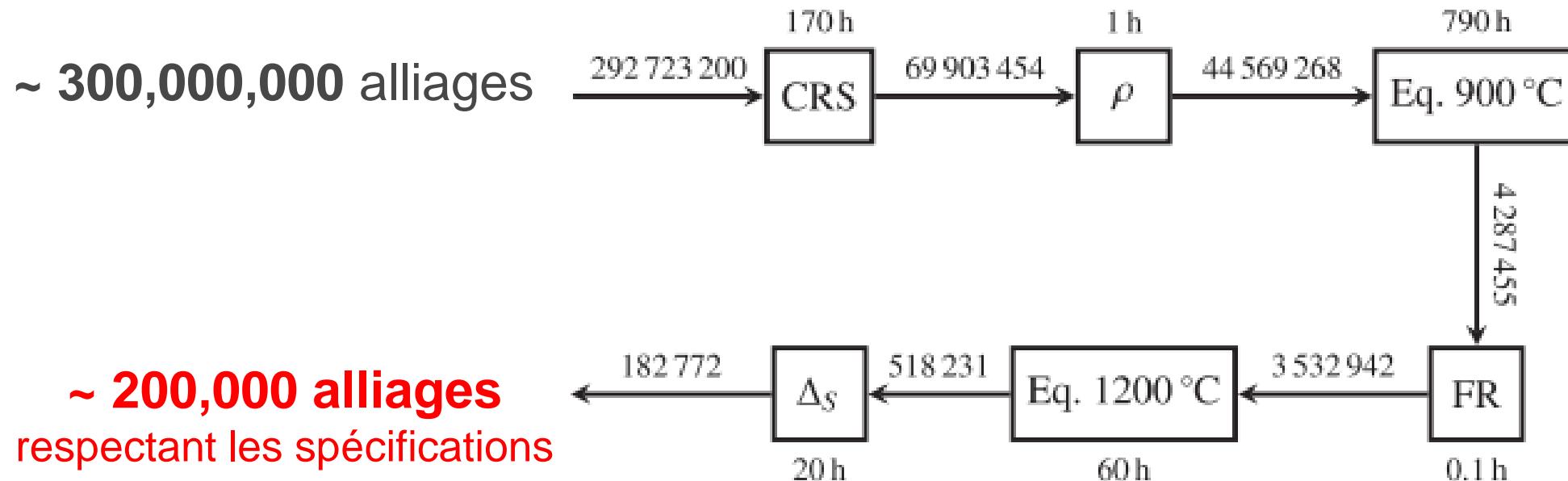
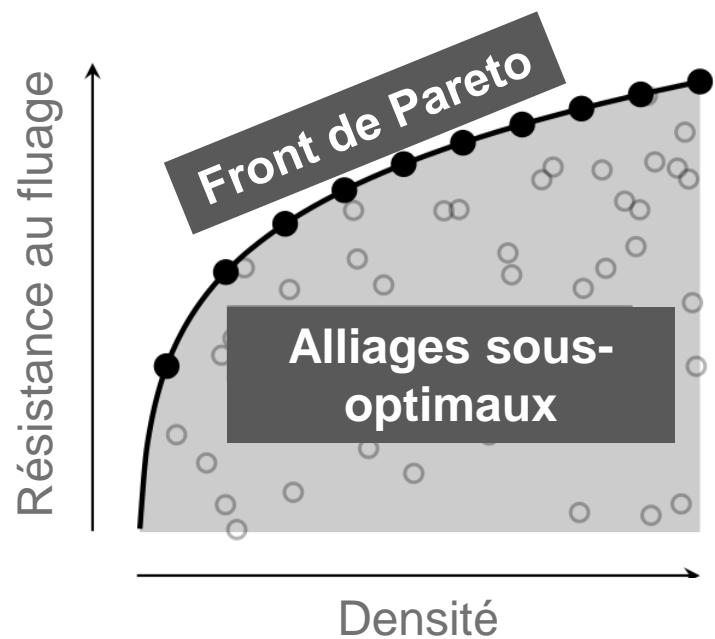


Fig. 2. Sequence of calculation steps. Each box represents a calculation (see text for details). The approximate time taken to perform each calculation is associated with their respective box, with the number of alloys that pass the previous criterion indicated between each step.

Sélection des alliages optimaux (force brute)

E. Menou J. Rame, C. Desgranges, G. Ramstein, F. Tancret Computational Materials Science 170 (2019) 109194

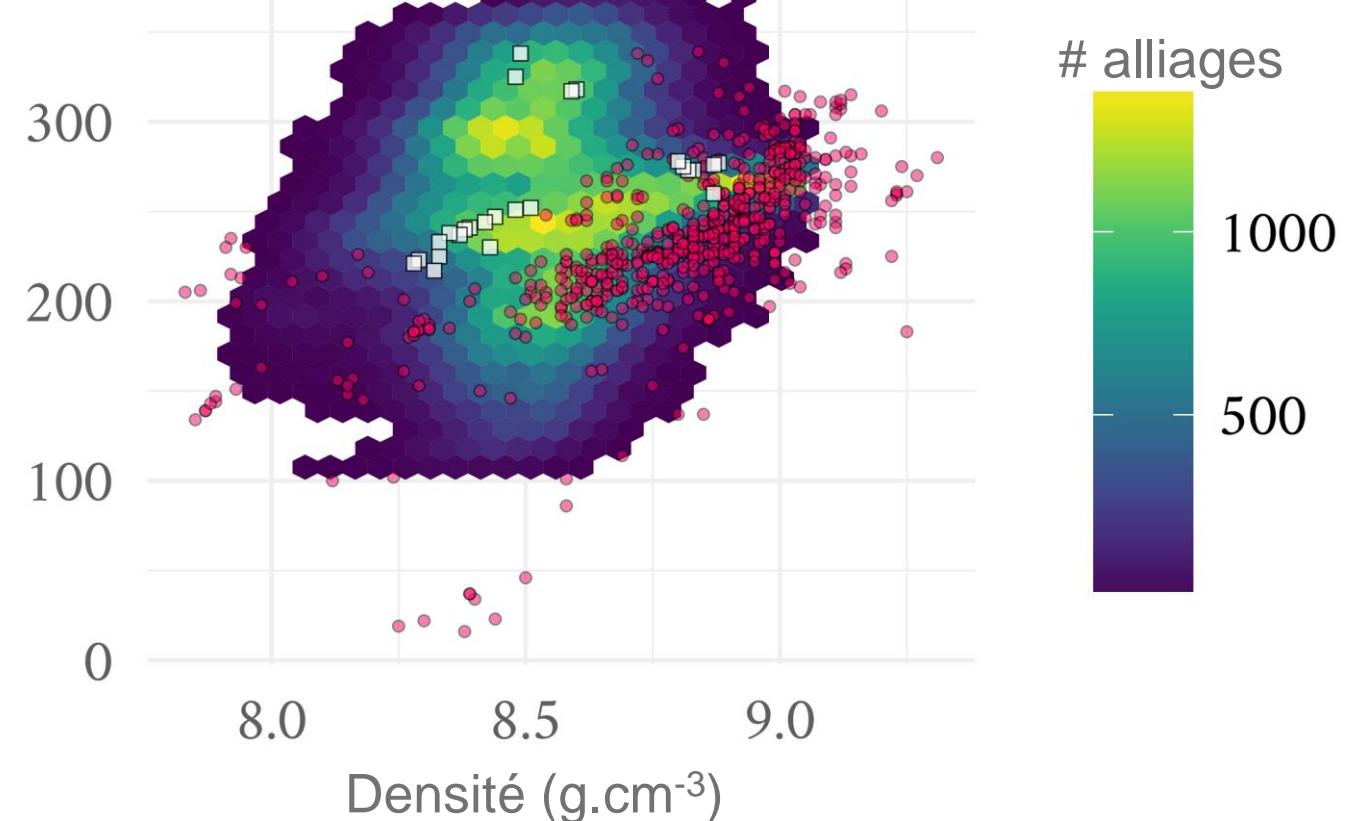
Tri de non-domination
selon les propriétés spécifiques



325 alliages restants
(réduction de 99.9999 % de l'espace)

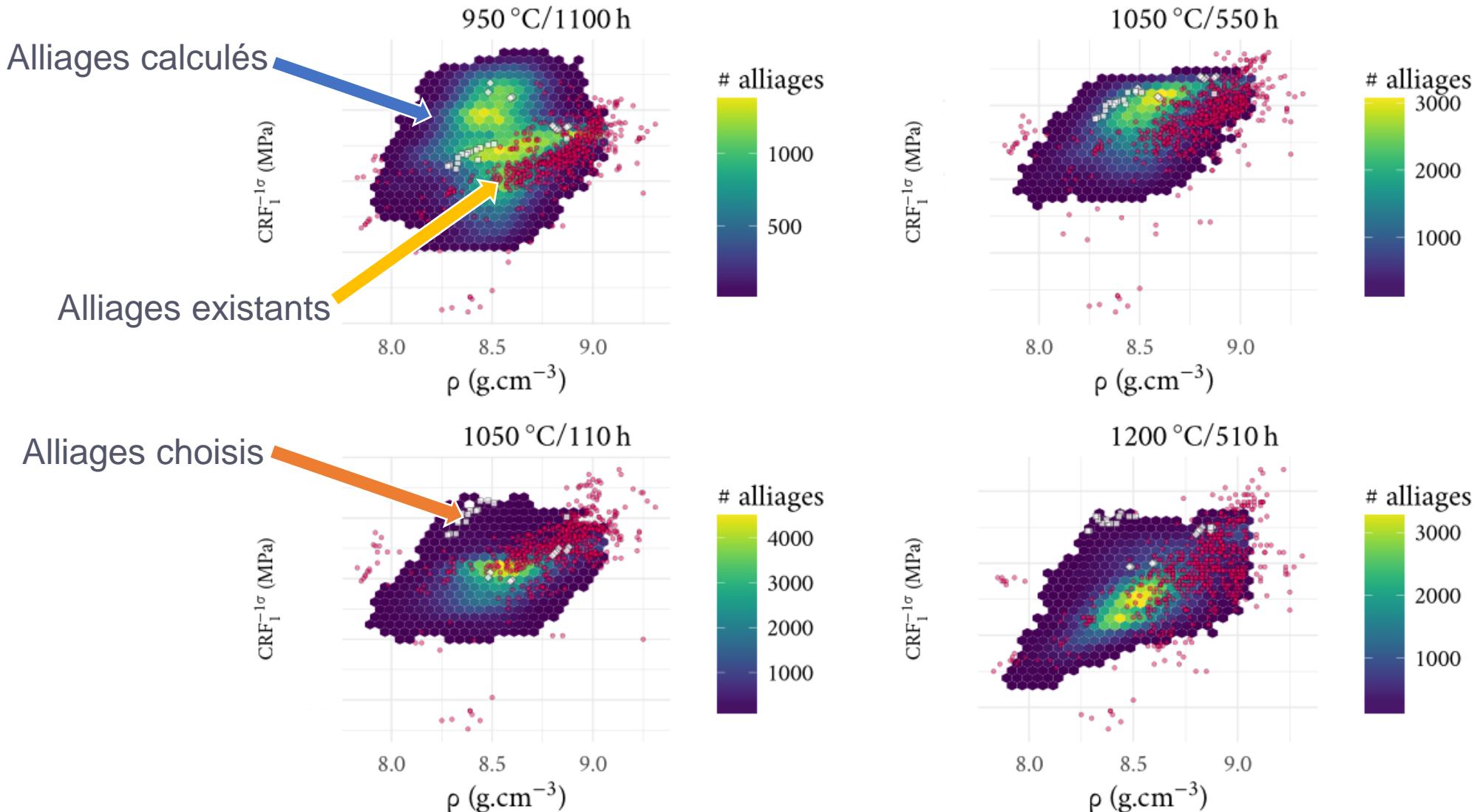
25 superalliages monocristallins haute performance et brevetables

Résistance au fluage à 950 °C

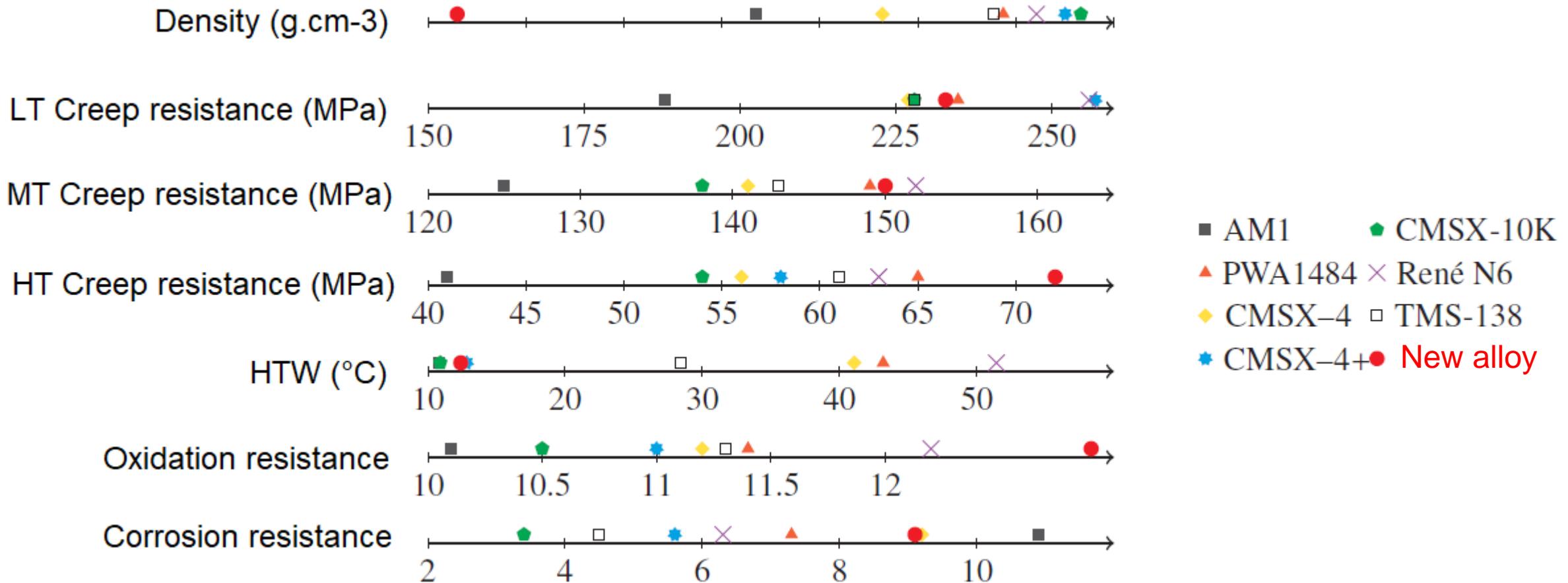


Contrainte de rupture par fluage prédictes à 4 couples température / temps

E. Menou et al., Computational Materials Science, 170 (2019) 109194



Alloy selection: comparison to commercial alloys

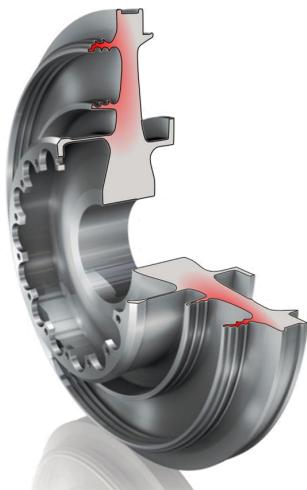


Combinatory Metallurgy

Example with use of **Genetics Algorithms**

From PhD thesis E.Menou (2016, Polytech Nantes)

- **Objectives**



Disc Alloys

Design specifications for power plants applications

CALPHAD

optimisation objectives

Thermo-Calc

microstructural assessment

Stable constitution: only γ , γ' and
 $M_{23}C_6$ (no TCP, η , δ ...)

Enough **free chromium** to protect
against corrosion: $(Cr)_{\gamma} \nearrow$

Good **fabricability** and **weldability**:
capped mol-% γ'

Gaussian processes

property estimation

Good **high temperature strength**:
UTS, **YS** and **CRS** ↗

γ' stability: lattice misfit $\delta \searrow$

Affordability: heat cost ↘

Combinatory Metallurgy

Example with use of Genetics Algorithms

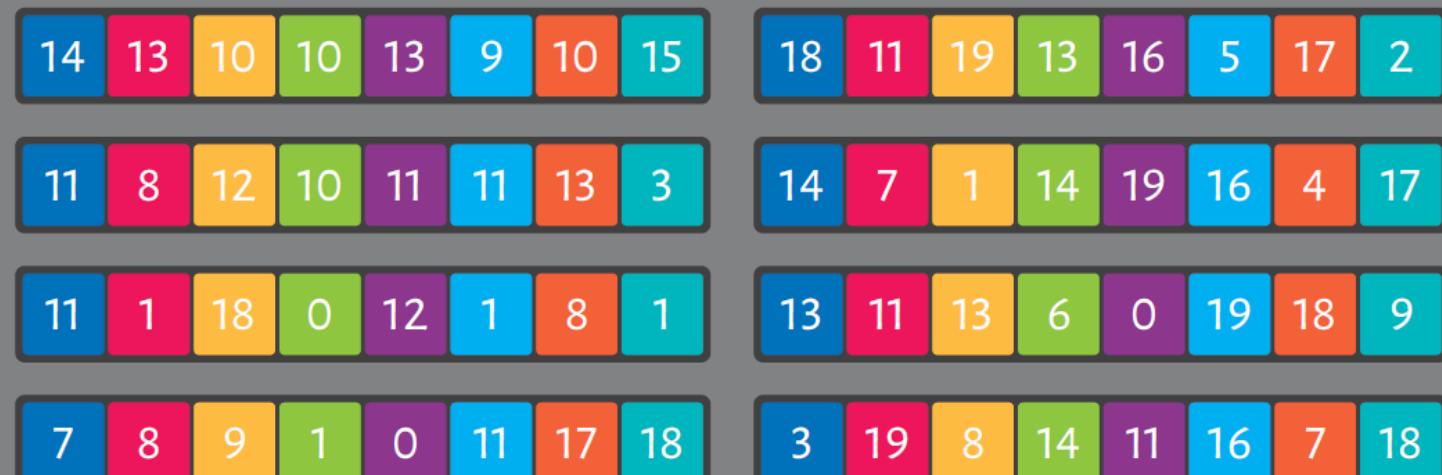
1 alloying element = **1 gene**

Cr

1 alloy = **1 individual** = 1 combination of genes

Cr Co Mo W Nb Al Ti Fe

Population = group of individuals = group of alloys



From PhD thesis E.Menou
(2016, Polytech Nantes)

Genetics Algorithms (*Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II*)

Rule: **selection** and **survival of the fittest**

- ▶ **Crossover:** hybridisation of 2 parents to form 2 children



- ▶ **Mutation:** spontaneous alteration of one or more genes



- ▶ **Elitism:** immortality of the best alloys



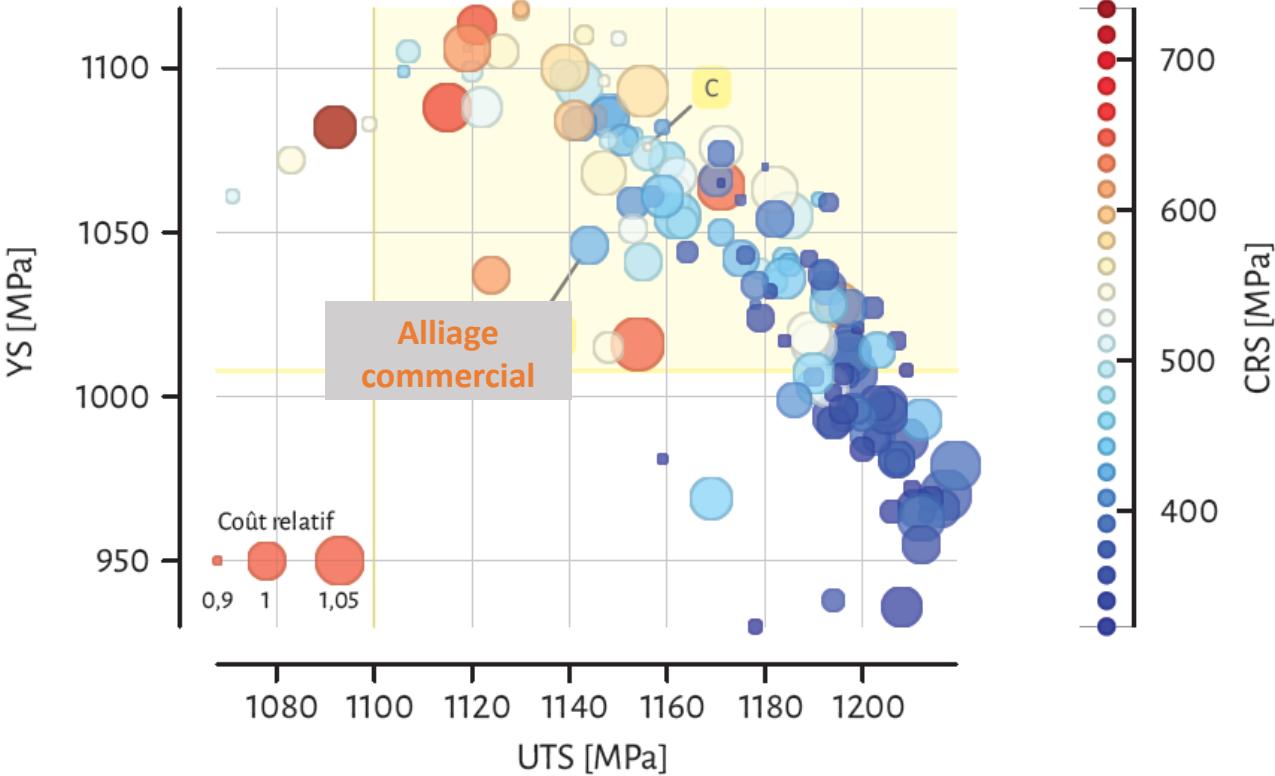
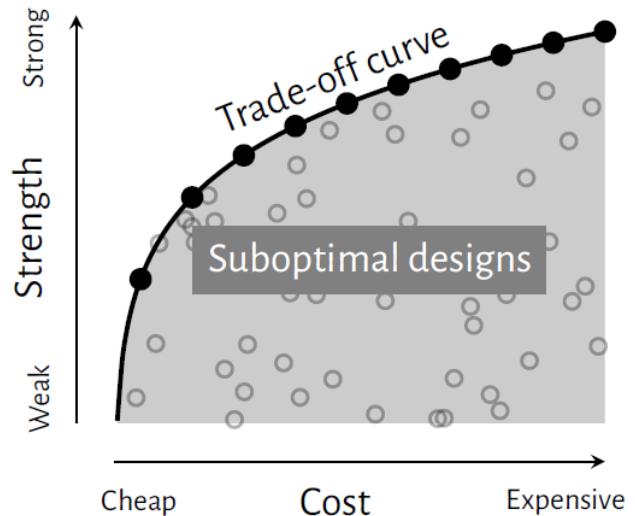
From PhD thesis E.Menou (2016,
Polytech Nantes)

Optimisation multicritère : algorithme génétique

From PhD thesis
E.Menou (2016,
Polytech Nantes)

Mono-objective → only **one** “best” alloy (the cheapest, the strongest)

Multiobjective → an **entire optimal set** of alloys



1000 générations après 310 h de calcul sur 2 x 4 coeurs (2,4 GHz) (environ deux semaines)

environ 1,46 millions d'alliages ont été évalués et 23,54 millions de calculs d'équilibre



Adaptation des modèles d'IA utilisés aux types de données

Spring rank + processus gaussien

Pairwise comparison (Spring Rank)

- Interactions between N alloys as a weighted, directed network, where A_{ij} is the number of interactions $i \rightarrow j$ suggesting that i is ranked above j .
- Creation of a ranking: SpringRank computes the optimal location in a hierarchy by making pairwise comparisons.

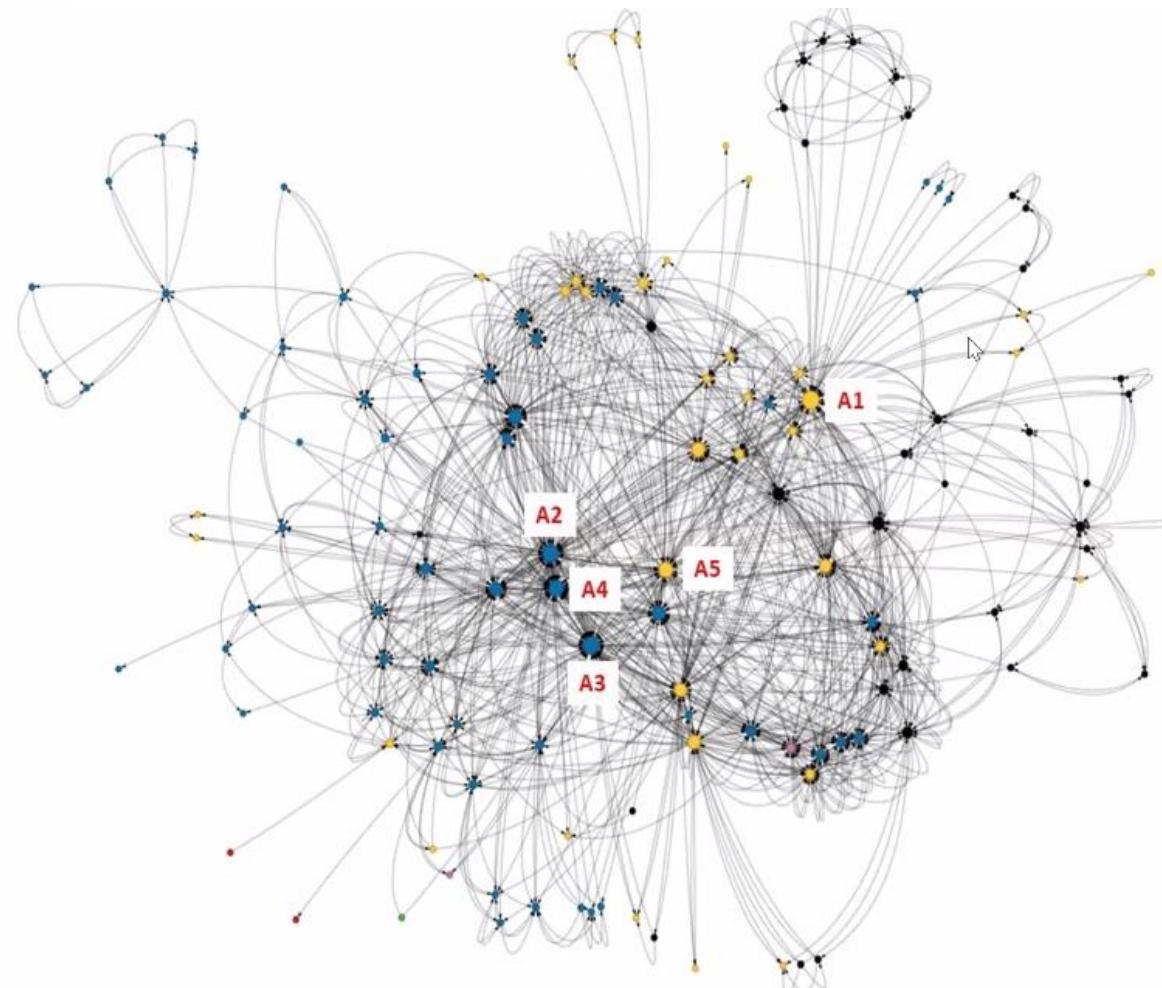
Alloy i	Alloy j	Score (mi/mj)
SS316	Hastelloy C276	2.27
	Inconel 625	3.55
	Inconel 625	1.57
Hastelloy C276	Inconel 625	3.16
	Inconel 625	25.28
Hastelloy C276	Inconel 625	8

Reference alloys

Alloy	Number of edges	Salts tested
SS_304	62	Chloride, Nitrate, Chloride + Sulfate, Carbonate, Fluoride
Inconel_625	58	Chloride, Nitrate, Chloride + Sulfate, Carbonate, Fluoride, Hydroxide, Vanadate, Fluoride + Carbonate
Inconel_600	57	Chloride, Nitrate, Chloride + Sulfate, Carbonate, Fluoride
Hastelloy_N	52	Chloride, Nitrate, Carbonate, Fluoride
SS_316	48	Chloride, Nitrate, Chloride + Sulfate, Carbonate, Fluoride, Fluoride + Carbonate, Hydroxide
SS_310	44	Chloride, Nitrate, Carbonate, Hydroxide, Vanadate
Inconel_617	42	Chloride, Nitrate, Sulfate, Fluoride
Hastelloy_X	40	Chloride, Nitrate, Carbonate, Fluoride
SS_321	39	Chloride, Nitrate, Chloride + Nitrate, Carbonate, Fluoride
SS_316L	38	Chloride, Nitrate, Chloride + Nitrate, Carbonate, Fluoride, Hydroxide

Metals 2024, 14(12), 1412; <https://doi.org/10.3390/met14121412>

Projet A-DREAM du PEPR DIADEM



Développement d'alliages : Evolution des « business model »

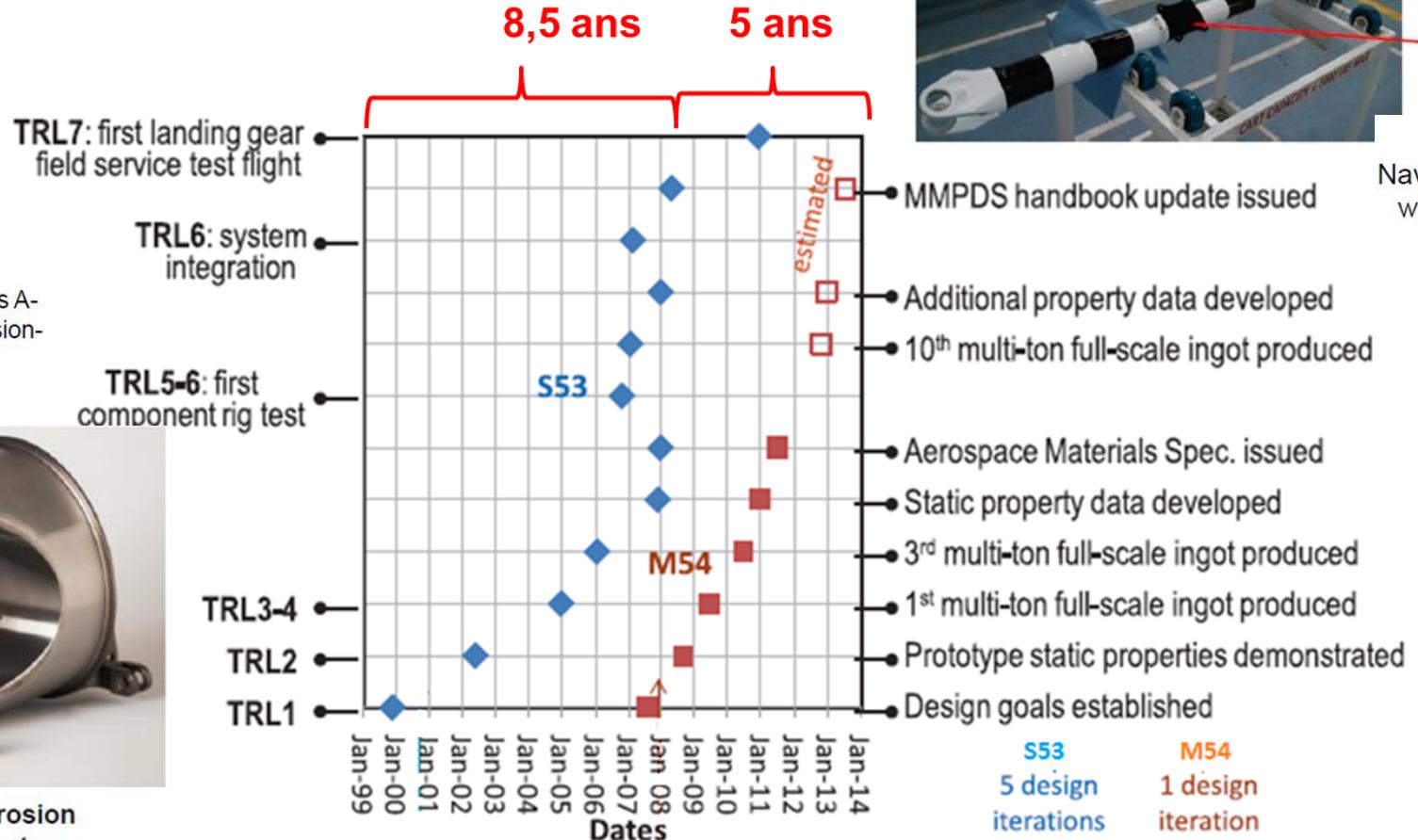


Questek Innovation, Northwestern University “spin-off”
Founded in 1997 by Greg Olson & Ray Genellie

Ferrium S53® steel
In flight service on U.S. Air Force platforms A-10, C-5 and T-38 to replace existing corrosion-prone steels.
From materials design to flight in 10 years



Meets strength and corrosion resistance requirements without need for toxic cadmium coating



Ferrium M54® steel

Navy qualified landing gear “hook shank” with >2x life vs. incumbent alloy; **cost savings of \$3 Million to fleet.**
From materials design to flight in 7 years



Développement d'alliages : Evolution du « business model »



OxMet Technologies develops, licenses, and manufactures proprietary alloys, alloy powders and alloy components for the aerospace, automotive, industrial and biomedical markets. Co-Founded by **D.J. Crudden**

Fondée en mars 2017

ALLOYS WE'VE DESIGNED
FOR CASTING:



ALLOYS WE'VE DESIGNED
FOR FORMING:



ALLOYS DESIGNED FOR
POWDER BED FUSION:



Alloys-by-Design: Development of a Range of SX Alloys



Alloy (wt.%)	Al	Cr	Co	Mo	Re	Ru	W	Ti	Ta	Hf
ABD-1	5.8	8	10	-	1.6	-	8.5	-	8.5	-
CMSX-4	5.6	6.5	9	0.6	3	-	6	1	6.5	0.1
PWA1484	5.6	5	10	2	3	-	6	-	8.7	0.1
ReneN5	6.2	7	8	2	3	-	5	-	7	0.2
TMS-82+	5.3	4.9	7.8	1.9	2.4	-	8.7	0.5	6	0.1



Alloy (wt.%)	Al	Cr	Co	Mo	Re	Ru	W	Ti	Ta	Hf
ABD-2	6.4	4	9	-	5.6	2.6	7.4	-	5.6	-
PW1497	5.6	2	16.5	2	6	3	6	-	8.3	0.2
TMS-162	5.8	2.9	5.8	3.9	4.9	6	5.8	-	5.6	0.1
TMS-138A	5.7	3.2	5.8	2.8	5.8	3.6	5.6	-	5.6	-



Alloy (wt.%)	Al	Cr	Co	Mo	Re	Ru	W	Ti	Ta	Hf
ABD-3	5.4	13	10	-	-	-	5	-	7	-
Nasair100	5.8	9	-	1	-	-	10.5	1.2	3.3	-
SRR99	5.5	8	5	-	-	-	10	2.2	3	-
ReneN4	3.7	9	8	2	-	-	6	4.2	4	-
PWA1483	3.6	12.2	9.2	1.9	-	-	3.8	4.2	5	-

ABD-1: Low Re 2nd Gen Creep

R.C. Reed, Z. Zhu, and D.J. Crudden,
PCT Patent Application, PCT/GB2016/05653

ABD-2: 4th Generation Creep Resistant

R.C. Reed, Z. Zhu, and D.J. Crudden,
PCT Patent Application, PCT/GB2016/052199

ABD-3: Corrosion resistant IGT alloy

R.C. Reed, Z. Zhu, and D.J. Crudden,
PCT Patent Application, PCT/GB2016/051985

Licence A&D Septembre 2019

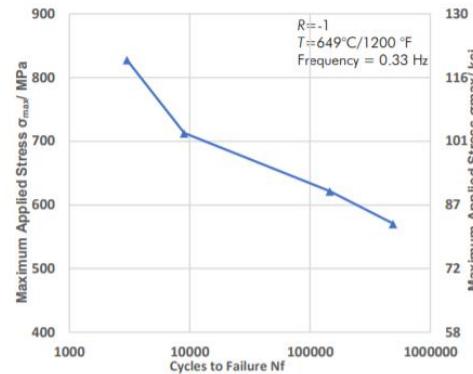
AUBERT&DUVAL

made with **ABD**®

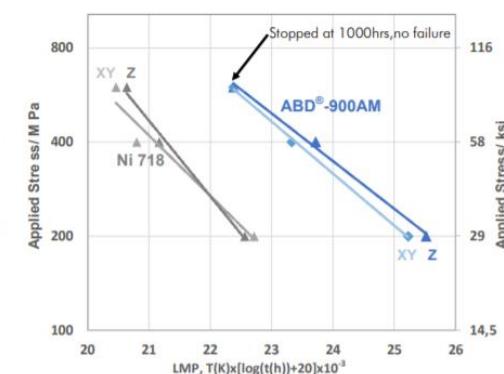
Pearl® Micro ABD®-900AM

Powder for Additive Manufacturing

FATIGUE PROPERTIES



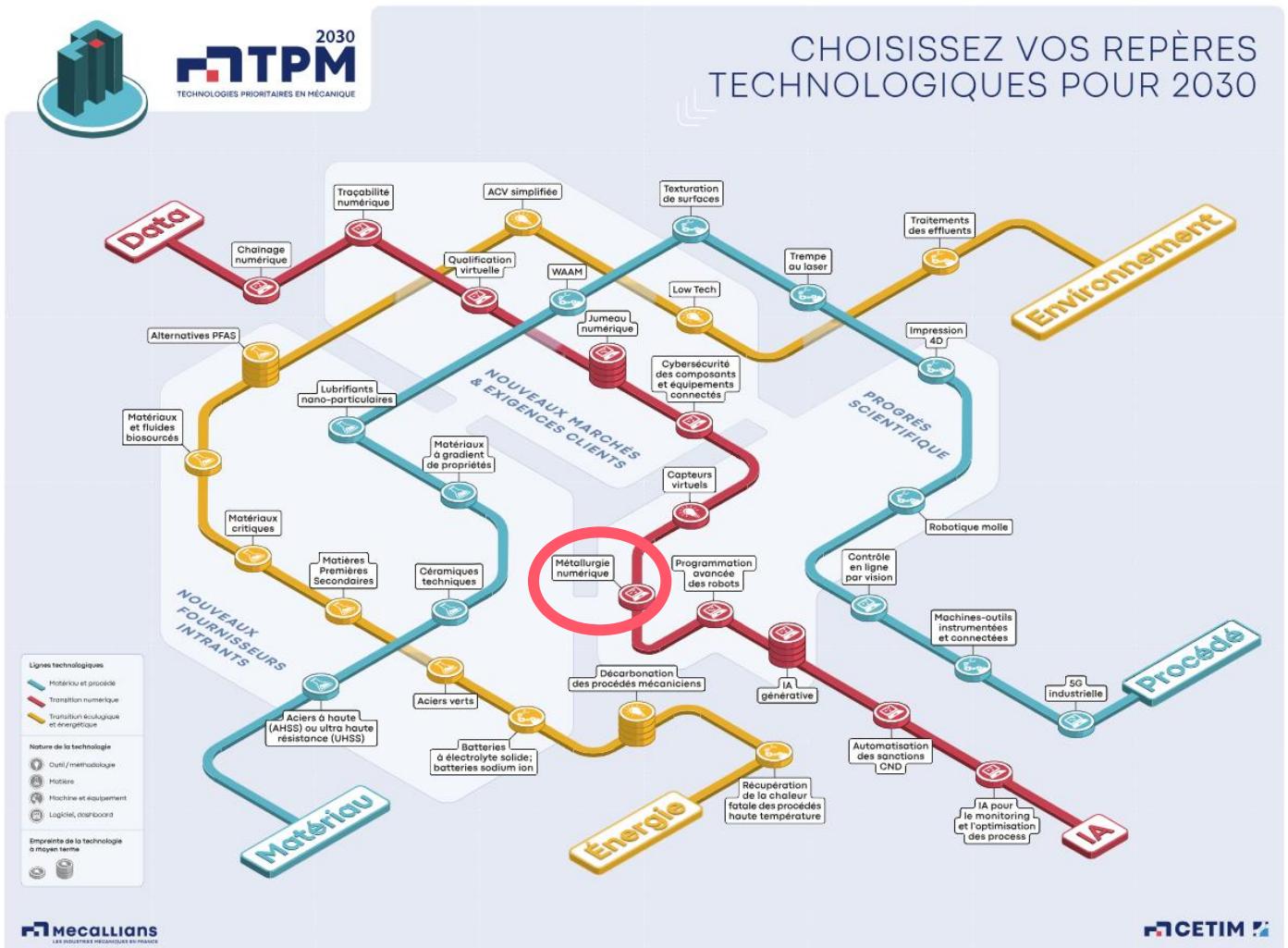
STRESS RUPTURE PROPERTIES



Low cycle fatigue properties of additively manufactured ABD®-900AM after full heat treatment cycle. Tested in accordance to ASTM E606.

Stress rupture properties of additively manufactured ABD®-900AM after recrystallisation anneal and full heat treatment cycle. Tested in accordance to ASTM E139. Larson-Miller Parameter evaluated with Temperature (T) in Kelvin and Time (t) in hours. Ni718 is additively manufactured and fully heat treated.

La “Métallurgie numérique” : vue comme une technologie prioritaire dans l'exercice « Technologies Prioritaires en Mécanique (TPM) » mené par le Cetim



Technologie combinant intelligence artificielle, simulation numérique et analyse des données pour optimiser les processus métallurgiques. Elle permet de concevoir et de tester virtuellement des alliages et des matériaux métalliques (structures, phases, compositions chimiques, traitements) en fonction de propriétés d'usage voulues, réduisant ainsi le besoin de tests physiques longs et coûteux. La métallurgie numérique améliore la performance des matériaux, **permet de prédire les propriétés mécaniques d'une pièce mécanique, accélère le développement de nouvelles solutions et contribue à une production plus efficiente et durable dans l'industrie mécanique.**

Conclusions

- La **complexité de la chimie combinatoire** permet un champ de recherche immense qui ouvre des possibilités d'innovation inédites **même pour les familles d'alliages traditionnels**.
- Aujourd'hui, les techniques numériques permettent de **développer les nouvelles nuances de matériaux** sur la base **de modèles théoriques**, en utilisant des méthodes de calculs massifs.
- Ces approches permettent de réduire significativement l'**empirisme** pour choisir des compositions optimales **pour une fonction précise**.
- Les **propriétés mécaniques finales** sont vues, parmi d'autres, comme des **critères de design pour la chimie de l'alliage en intégrant les contraintes liées au procédé de fabrication, aux coûts dès les premiers TRL**.
- Trouver le bon compromis entre les différentes propriétés — par exemple tenue mécanique / résistance à l'oxydation — et identifier les compositions chimiques optimales pour une pièce est devenu accessible par les outils mathématiques, dont l'IA, et les modèles issus de la science des matériaux.
- Les **méta-modèles issus de l'IA** sont utiles **même s'ils ne sont pas toujours parfaits**. Il faut les confronter à des expériences dédiées pour tester leur robustesse, et les améliorer constamment.
 - ***Small data ...***
 - **la construction de la base de données dépend de l'utilisation qu'on voudra faire du métamodèle**

Conclusions et Perspectives

Les principaux modèles qui peuvent être utilisés

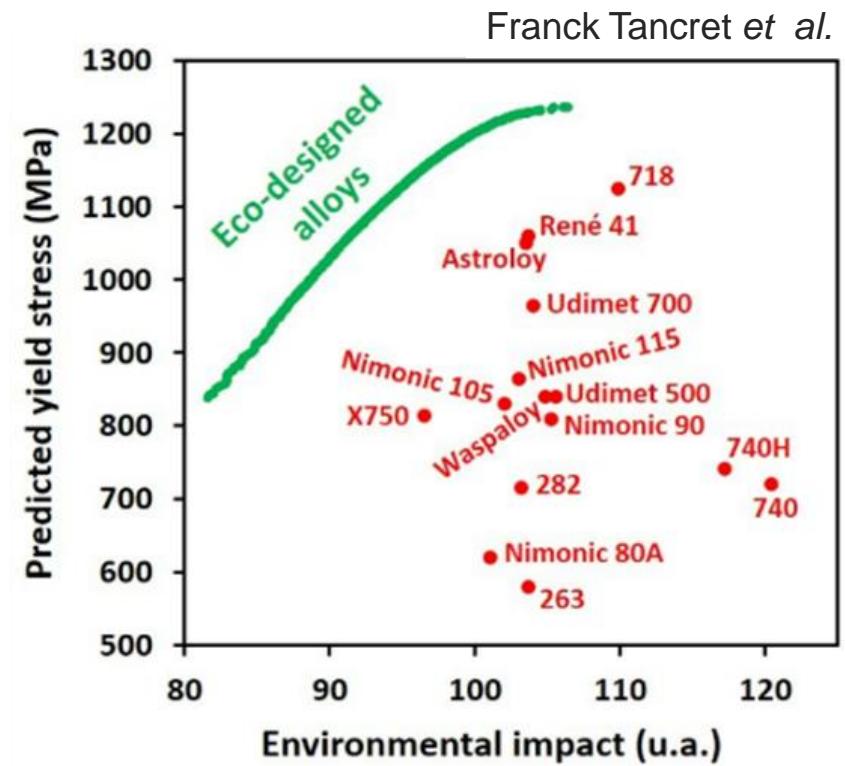
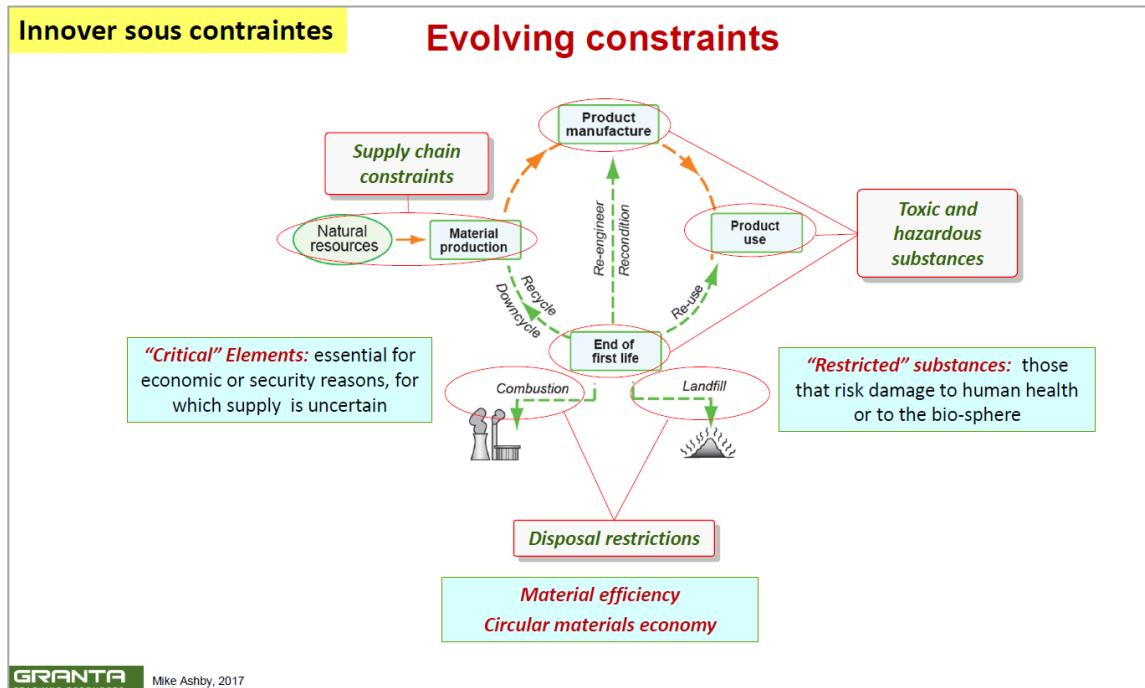
- i) Les modèles pouvant être mis en équation « simplement ». C'est par exemple le cas du coût des éléments d'alliages ou de la densité, mais on peut aussi trouver des modèles de « métallurgie physique » pour certaines propriétés [cf. Reed *et al.*].
- ii) Les prédictions issues de logiciels de thermodynamique prédictive par l'approche « **CALPHAD** » (CALculation of PHAse Diagrams). **Indispensable aujourd'hui.**
- iii) Les modèles de type *krigeage* issus de « fouille de données » (*data mining*), consistant à opérer des régressions à partir de bases de données regroupant la composition et les caractéristiques de nombreux alliages différents.

Rôle Clé des experts matériaux de chaque domaine dans la définition
des **indices de performance** et dans la **construction et l'exploitation des bases de données**

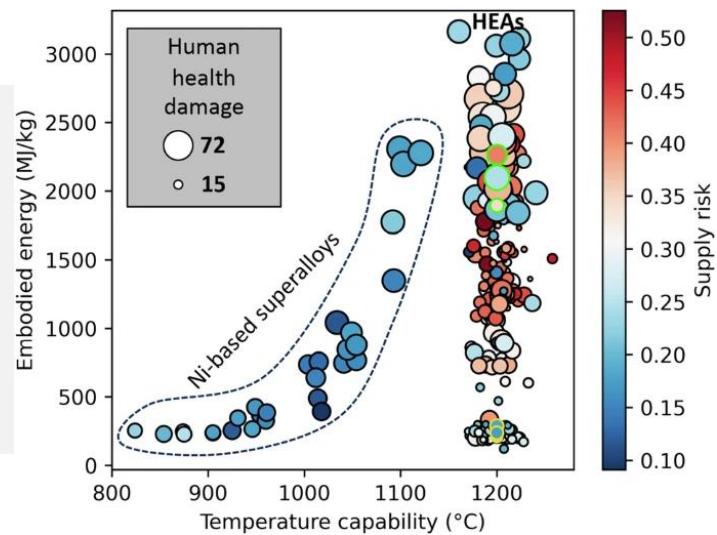
Méthodologie appliquée dans plusieurs projets en cours dans le cadre PEPR DIADEM

Nouveau réseau ISAS (RITMIC) autour de la thématique .

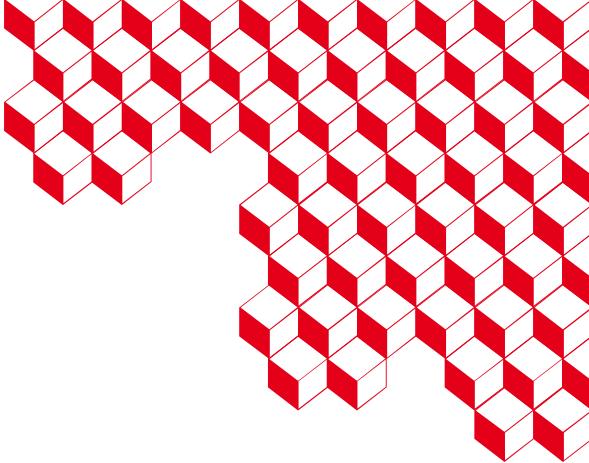
De nouveaux critères de Design....



Gorsse, S., Langlois, T., Yeh, AC. et al. Sustainability indicators in high entropy alloy design: an economic, environmental, and societal database. Sci Data 12, 288 (2025). <https://doi.org/10.1038/s41591-025-04568-x>



Exemple d’optimisation simultanée de la limite d’élasticité de superalliages à base de nickel (prédicté par *machine learning*) et de leur impact environnemental. Les alliages conçus (en vert) présentent des caractéristiques plus intéressantes que les superalliages commerciaux (en rouge).



Merci

Co-workers : Edern Menou, J. Rame - Safran-Tech
G. Ramstein, F. Tancret - Nantes University

CEA SACLAY
91191 Gif-sur-Yvette Cedex
France
clara.desgranges@cea.fr
. + 33 1 69 08 20 65

Bibliographie

Edern Menou « *Conception d'alliages par optimisation combinatoire multiobjectifs : thermodynamique prédictive, fouille de données, algorithmes génétiques et analyse décisionnelle* » Thèse de l'Université de Nantes (2016)
<https://www.theses.fr/2016NANT4011>

Madeleine Bignon « *Contribution à la conception computationnelle d'alliages de titane ou à haute entropie : prédiction de l'occurrence de la transformation martensitique de trempe ou de déformation* » Thèse de l'Université de Nantes (2020) <https://www.theses.fr/254841759>

Franck Tancret « *Vers l'éco-conception et la géo-conception de nouveaux alliages métalliques* » dans le livre blanc de la SF2M , <https://sf2m.fr/livre-blanc/>

Alloys-by-design: A low-modulus titanium alloy for additively manufactured biomedical implants
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117749>

Gorsse, S., Langlois, T., Yeh, AC. et al. Sustainability indicators in high entropy alloy design: an economic, environmental, and societal database. *Sci Data* **12**, 288 (2025). <https://doi.org/10.1038/s41597-025-04568-x>