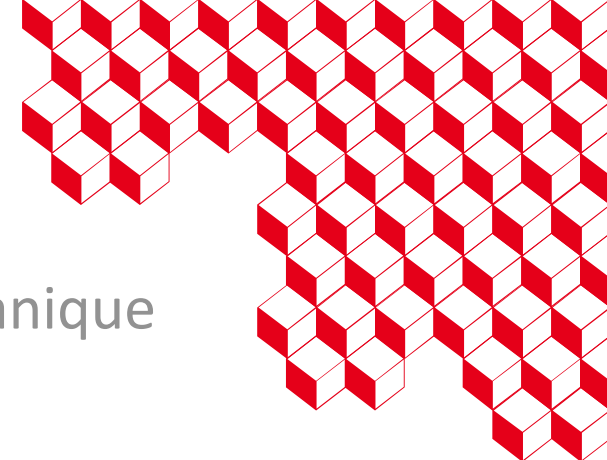




isds

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



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

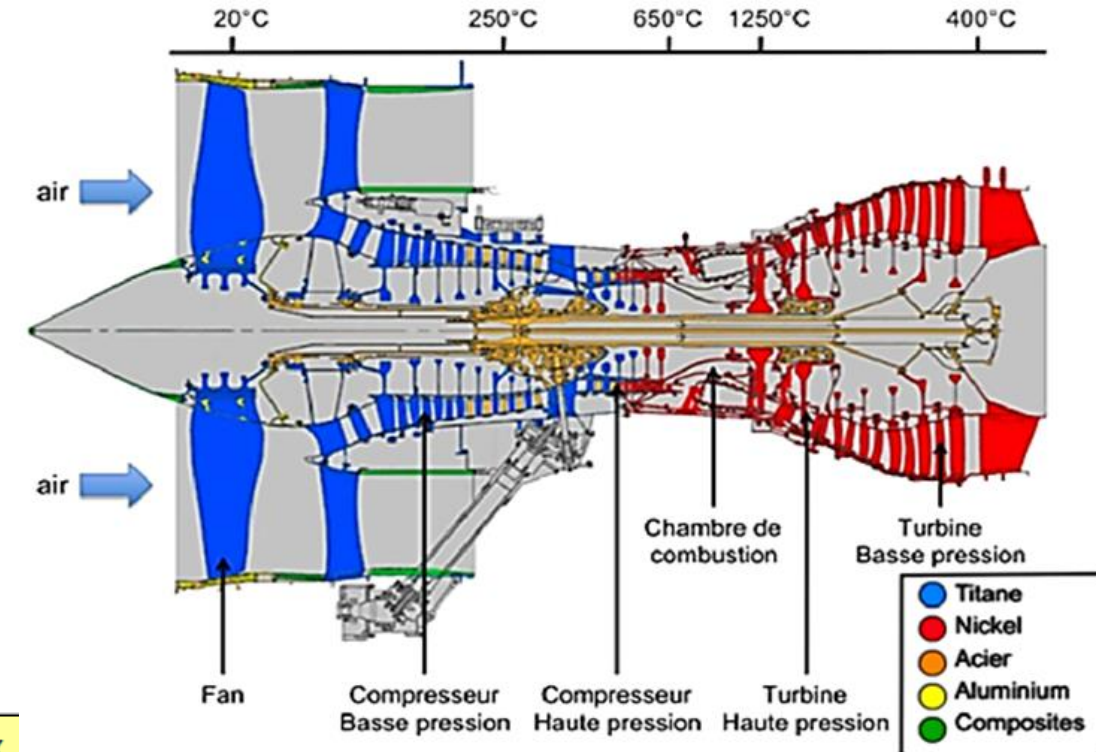
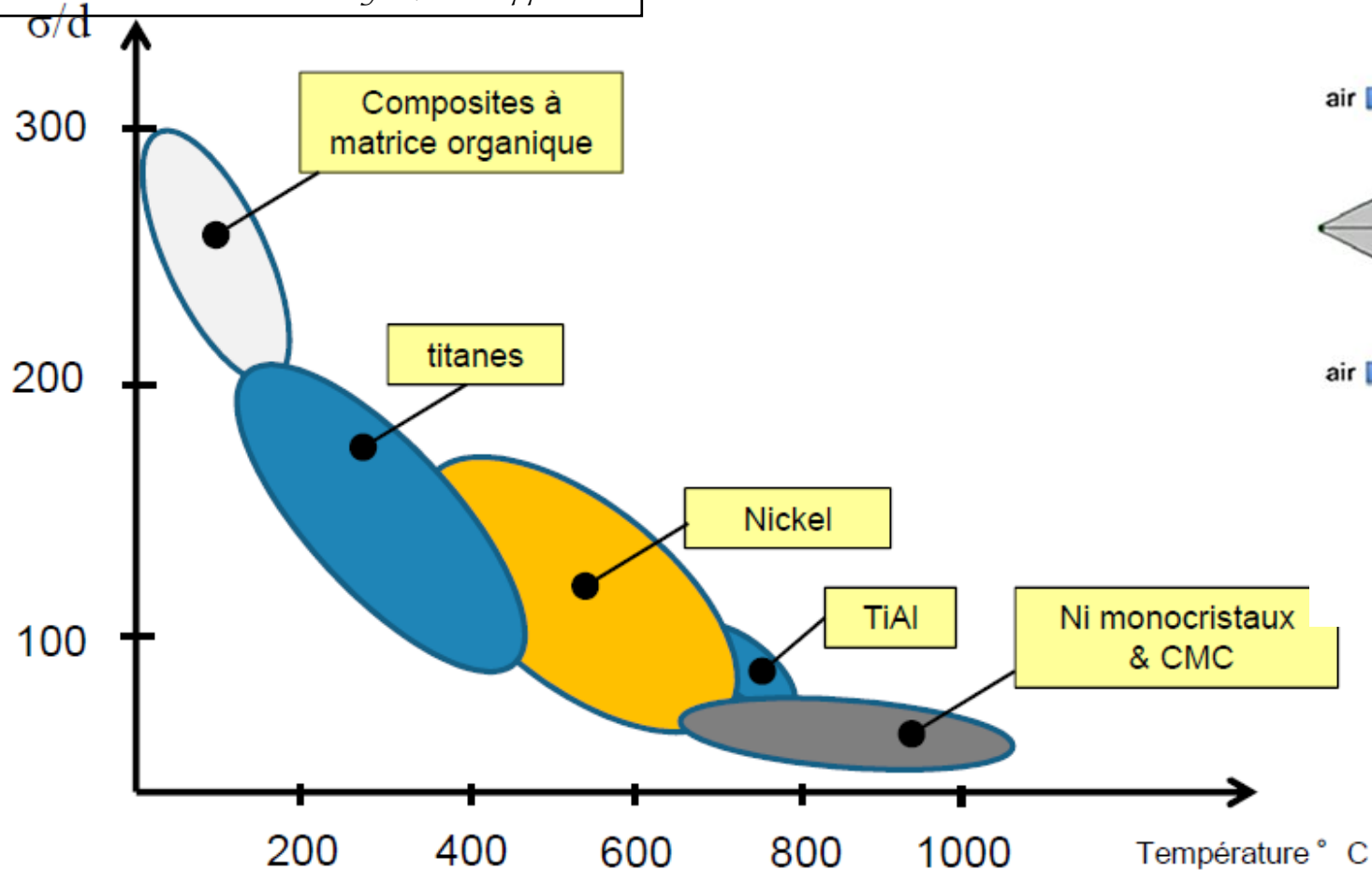
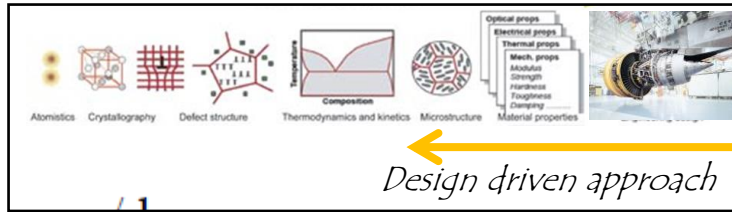
Clara DESGRANGES

CEA-ISAS/DRMP/S2CM

[clara.desgranges@cea.fr](mailto:clara.desgranges@cea.fr)

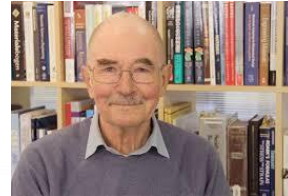
Co- workers : Edern Menou, J. Rame - Safran-Tech  
G. Ramstein, F. Tancret - Nantes University

# Choix matériaux multi-critères = Compromis

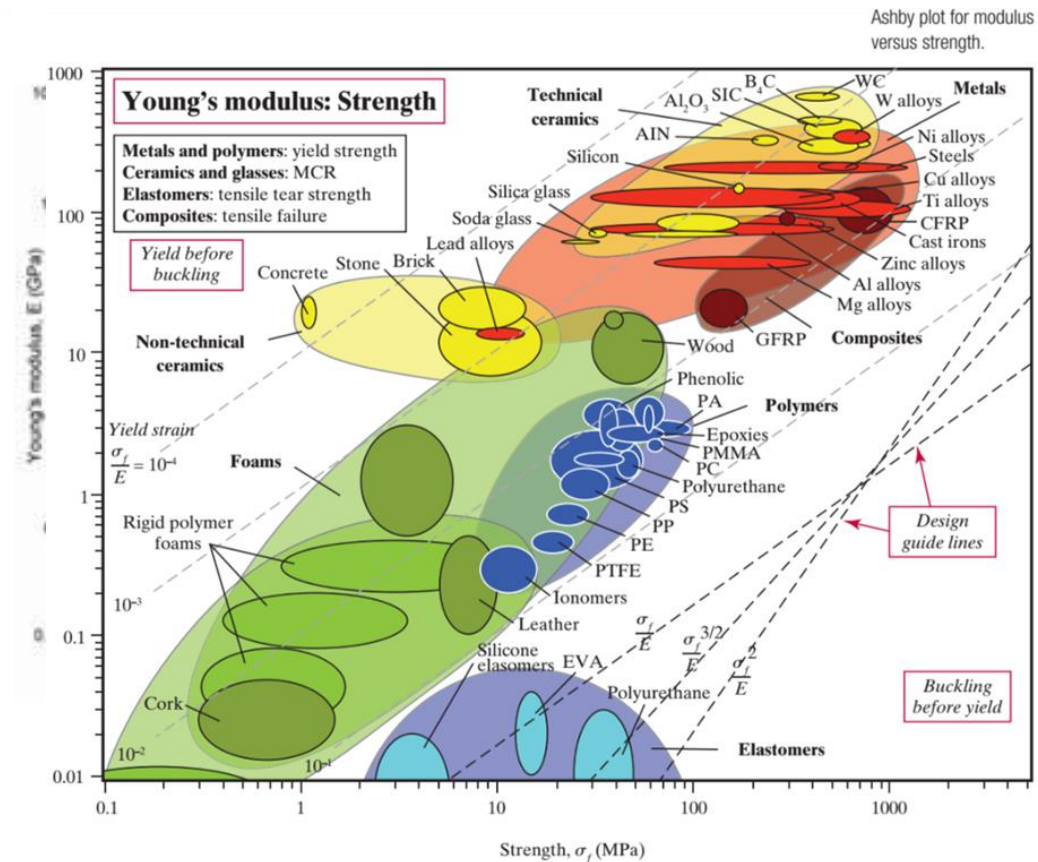
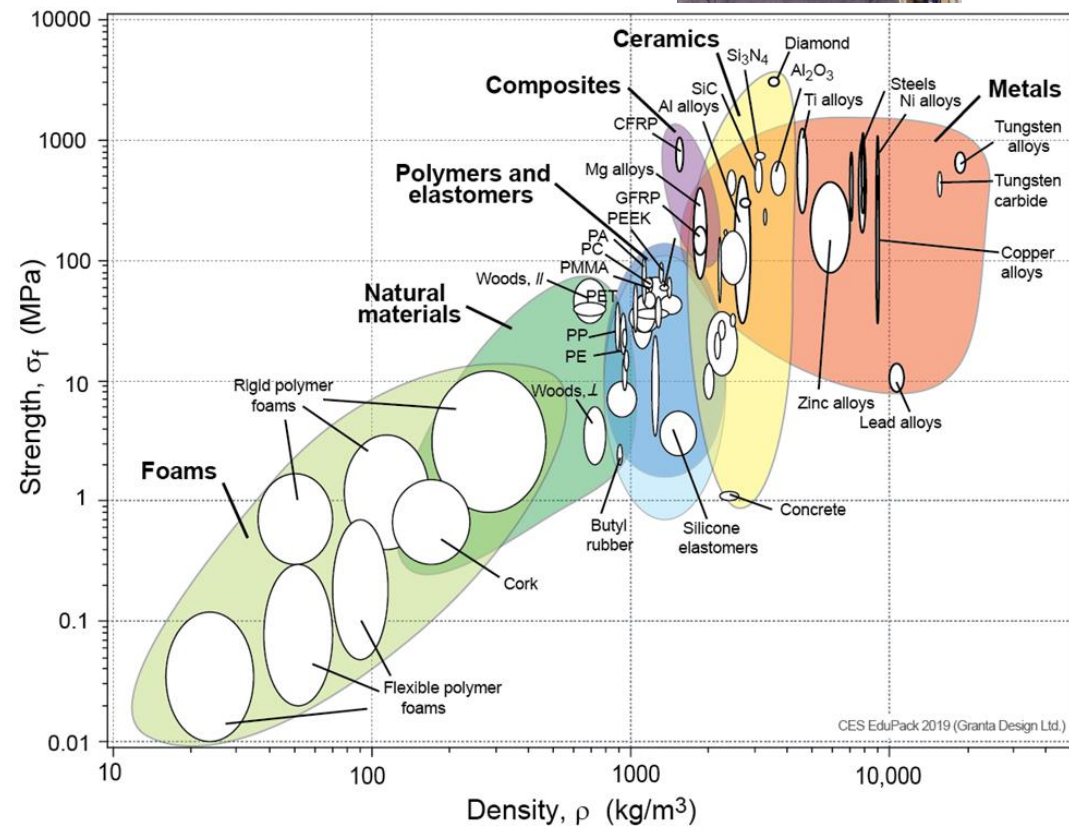
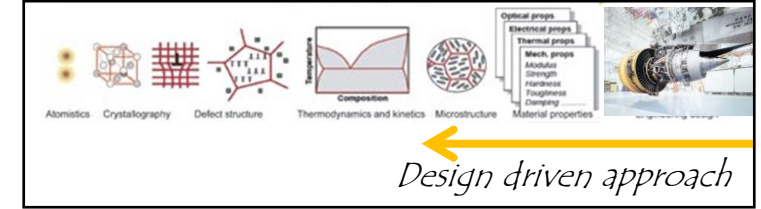


# Cartes de performances des matériaux

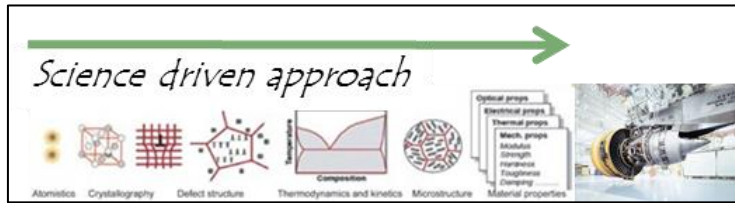
University of Cambridge, **M. Ashby** → **GRANTA** → **Ansys**



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

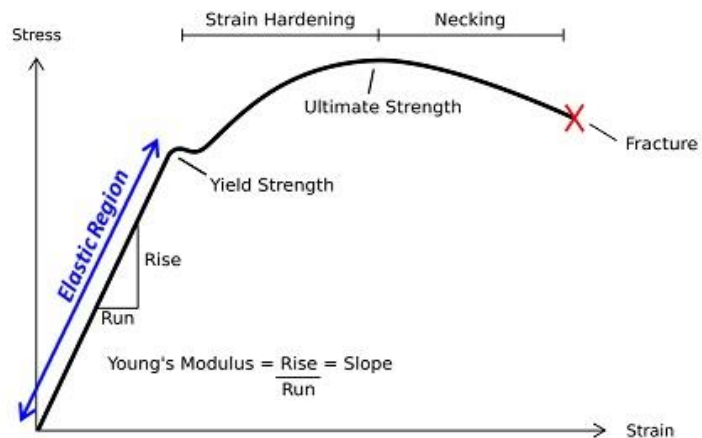
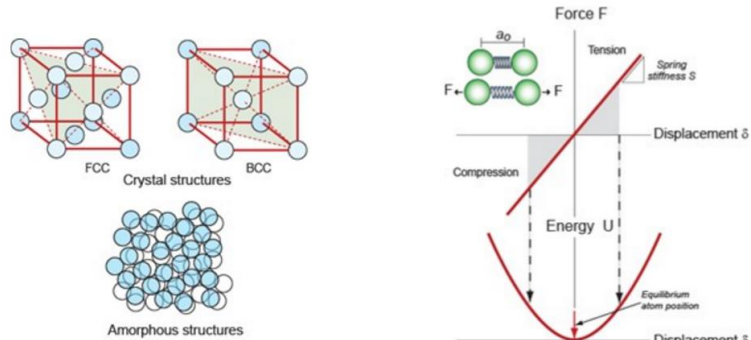


# Origines des différentes propriétés

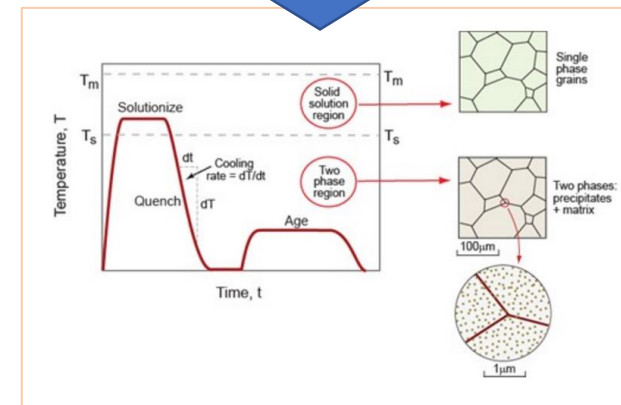
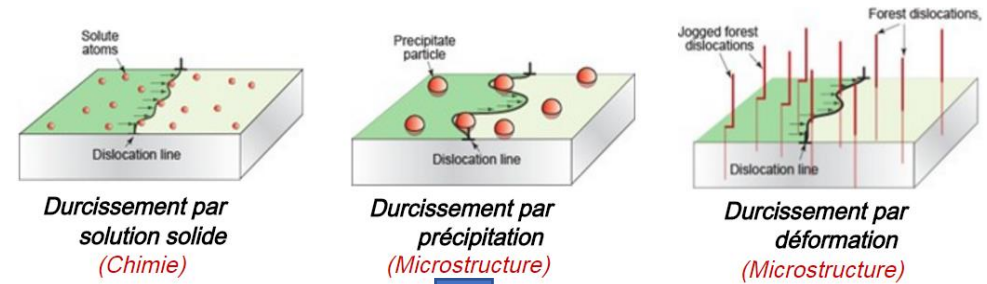


**Densité** : Masse atomique et organisation des atomes

**Rigidité** : Liens interatomiques et organisation des atomes



**Métaux** : Mécanisme de durcissement – épinglage de dislocations





# Ni-base Superalloys

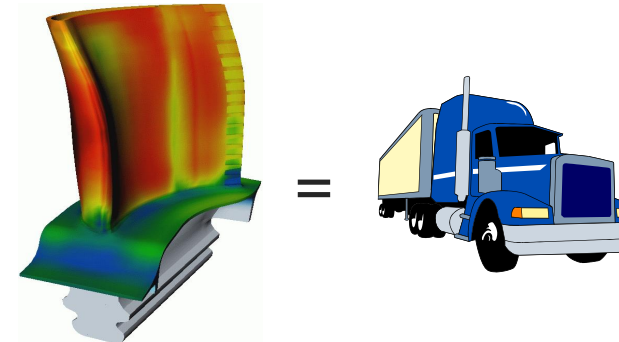
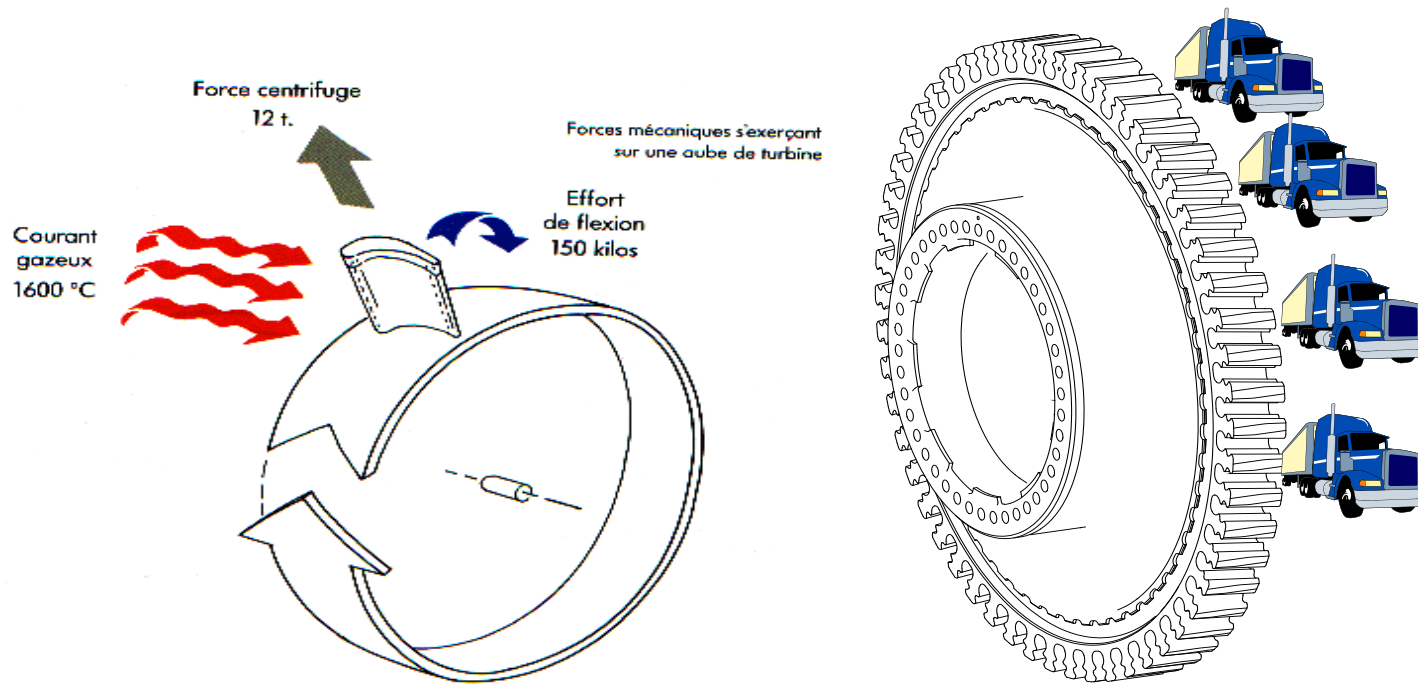
## Very high thermomechanical solicitations in service

Température 450 et 700°C

Contrainte mécanique

Alésage :  $\sigma_t \sim 1100 \text{ Mpa}$

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



Each blade could be seen  
as a 22 tonnes truck

# Superalloys base Nickel

## Matériau : Alliage IN718

### Composition chimique

	Ni	Cr	Fe	Nb	Mo	Al	Ti	Mn	Si	C
wt. %	52	19	19	5,2	3	0,6	0,8	0,2	0,2	0,05
at. %	50.5	21.1	19.7	3.2	1.8	1.3	1.0	0.2	0.4	1.4



Base



Durcissement par solution solide



Précipitation de phase durcissante

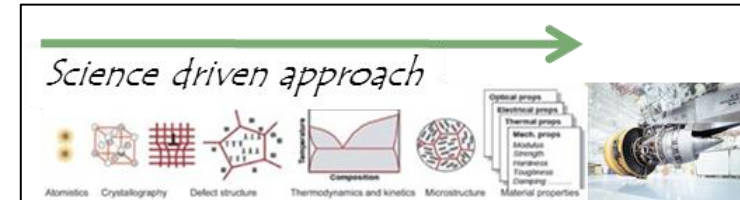


Renforcement des joints de grain



Elément de protection à l'oxydation et la corrosion

*The international nickel company*



## Microstructure :

$\gamma$  : Ni, matrice cubique face centrée

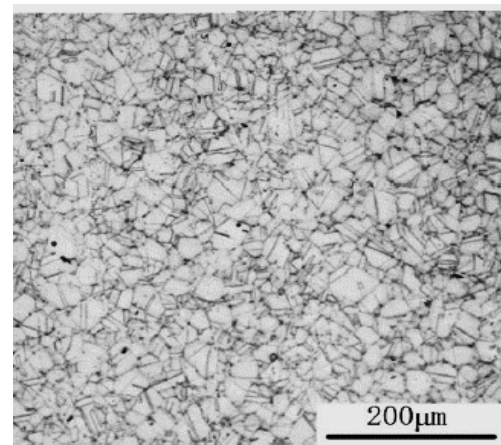
$\gamma'$  :  $\text{Ni}_3(\text{Al}, \text{Ti})$ , cubique simple

$\gamma''$  :  $\text{Ni}_3\text{Nb}$ , tétragonale

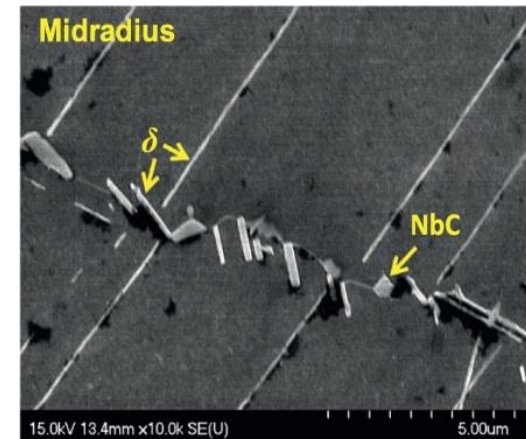
$\delta$  :  $\text{Ni}_3\text{Nb}$ , orthorombique

MC : NbC

Autres : Laves,  $\text{M}_6\text{C}$ ,  $\eta$



Optique, Forgé, Wang et al. (2010)

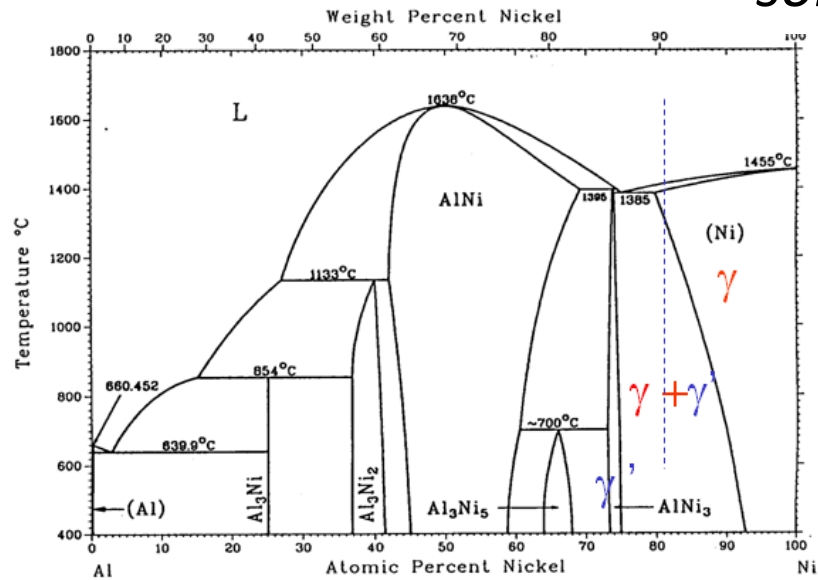


MEB, Chamanfar et al. (2013)



MET, Cozar et Pineau (1973)

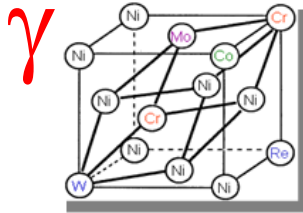
# Strengthening $\gamma'$ phase $\text{Ni}_3(\text{Al,Ti})$ in austenic $\gamma$ phase (Ni Cr Co...)



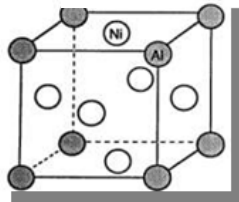
Al

Ni

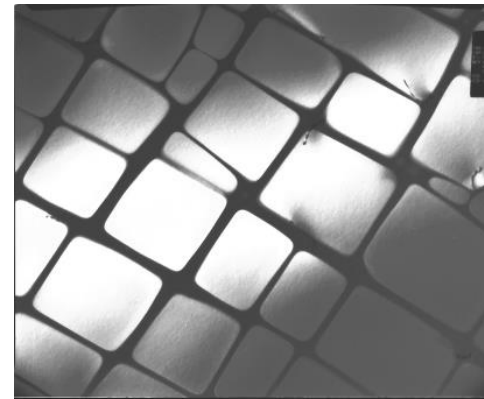
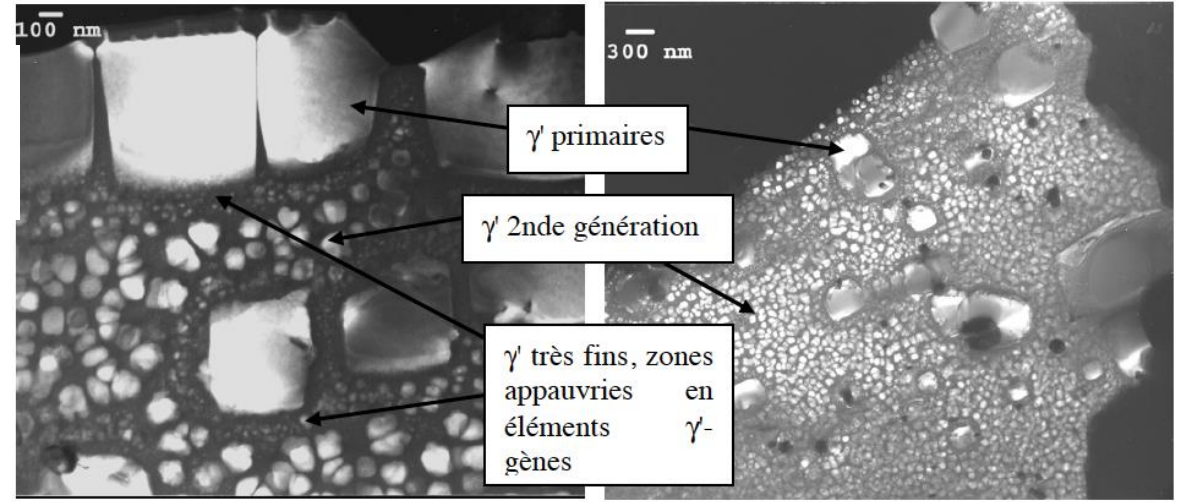
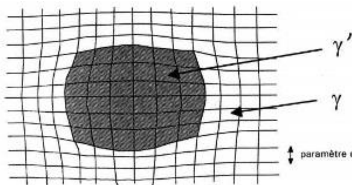
*Disordered  
solid solution*



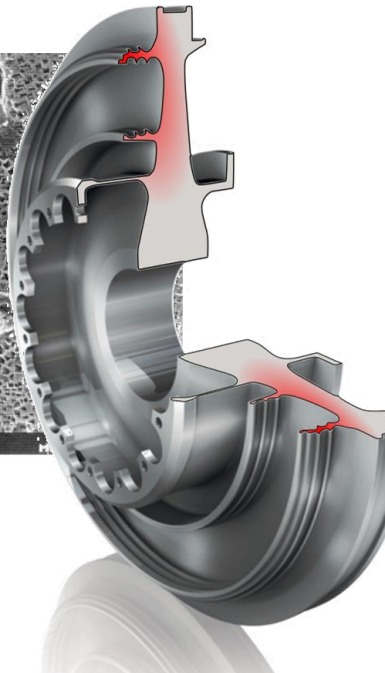
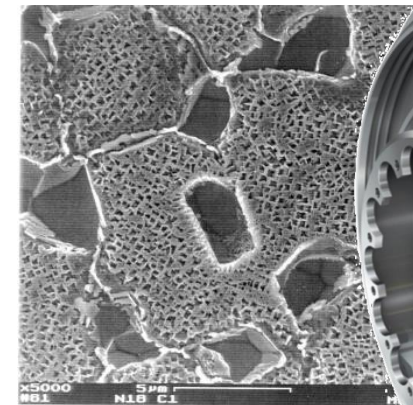
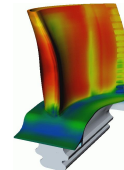
$\gamma'$



*Ordered phase*

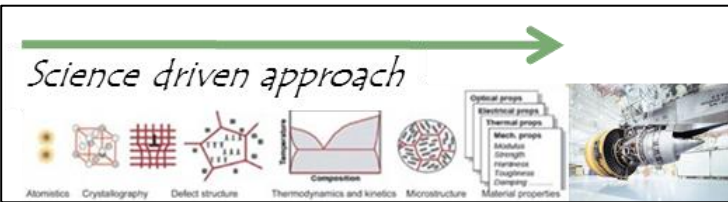


500 nm

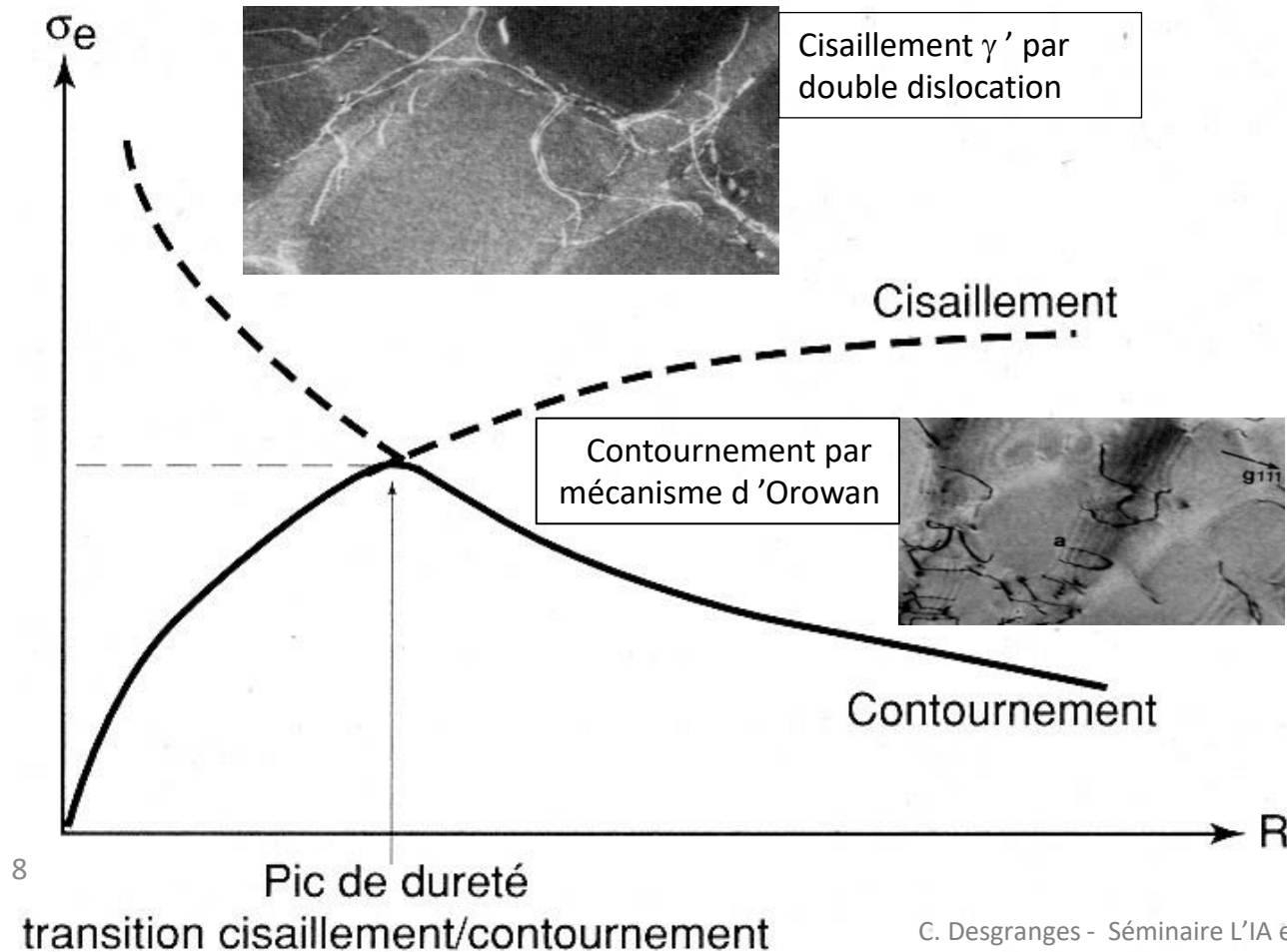




# Lien microstructure- propriétés mécanique



## 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  $R^{1/2}$ )

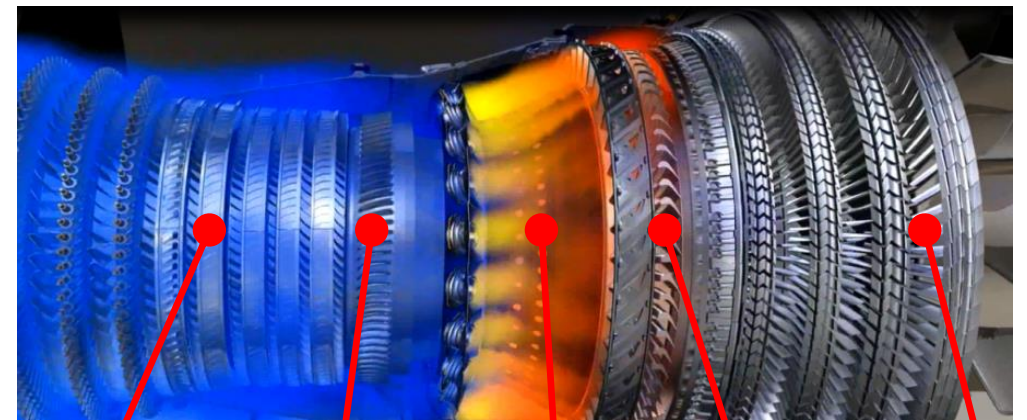
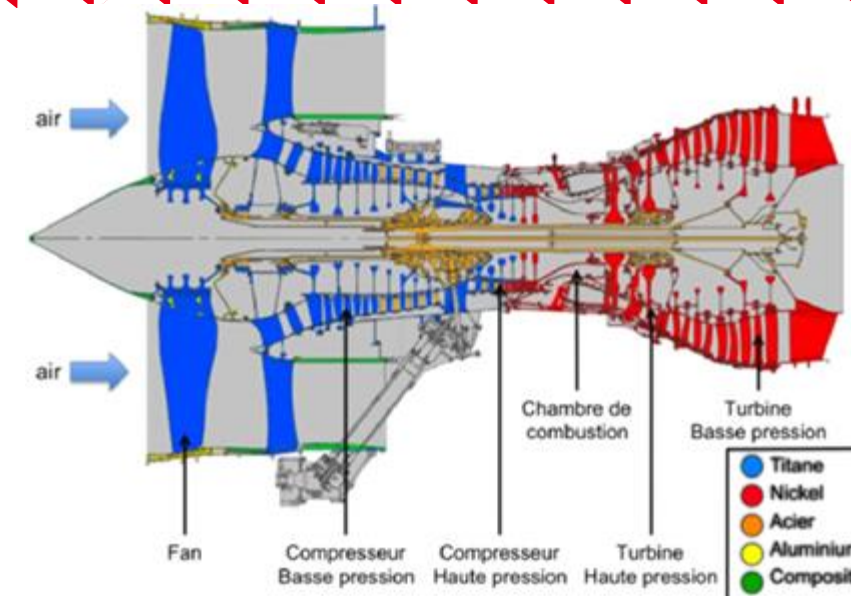
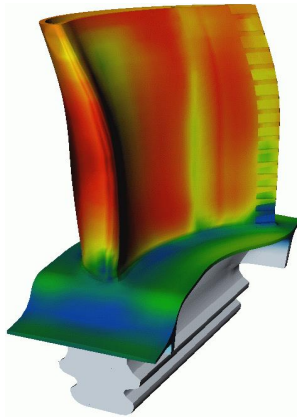
⇒ en fonction de  $R$ , c'est le mécanisme correspondant à la plus faible augmentation de CRSS qui fonctionnera



# Conception numérique d'alliages

Contexte

Exemple d'application : superalliage pour aube SX



450°C

650°C

1700°C

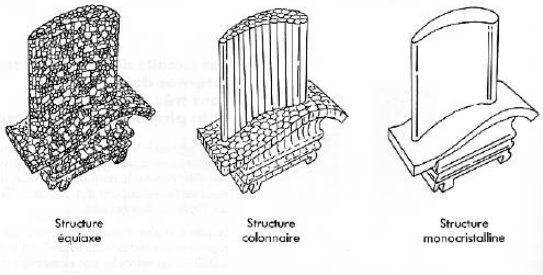
1300°C

650°C

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

Alliage SX de Fonderie

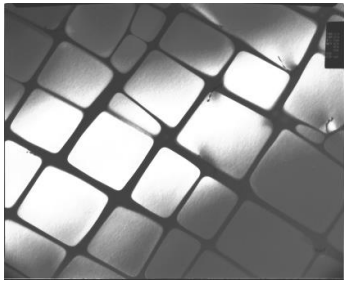
High pressure turbine blades



Defaut type Freckles



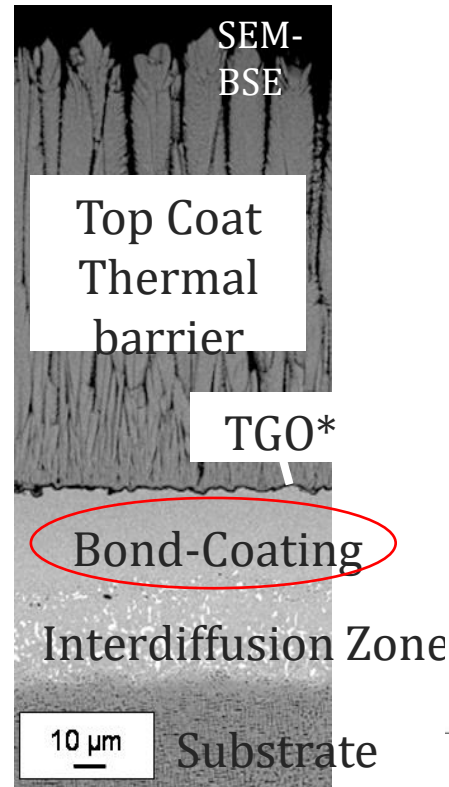
Fluage  
Fatigue  
Oxydation cyclique  
Corrosion



500 nm



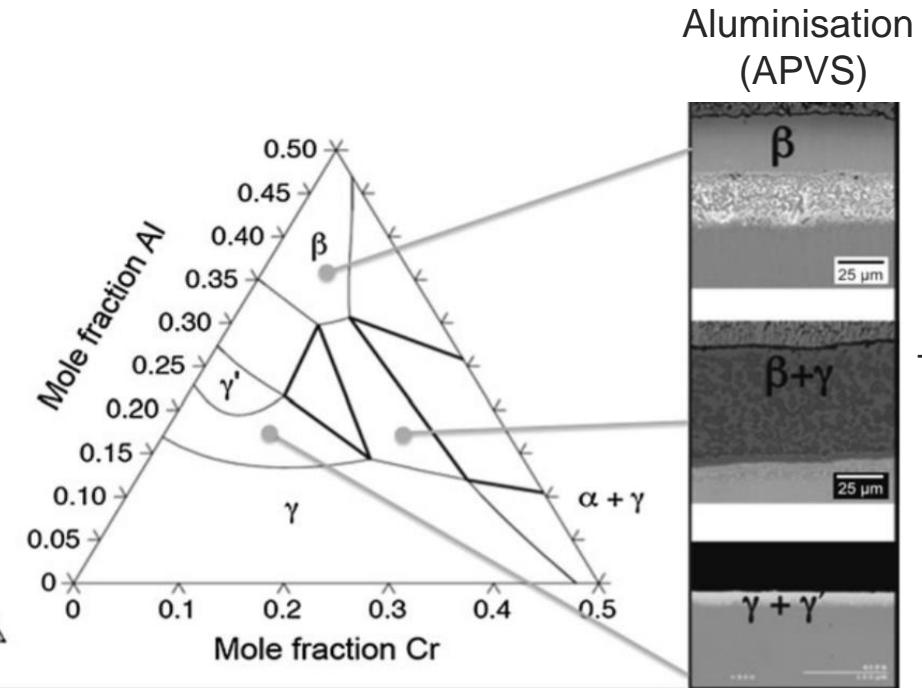
$T_{\text{max gases}} \approx 1600 \text{ }^{\circ}\text{C}$



$\Delta T^{\circ}$

COOLING

Les différents types de sous-couche  
(*Bond Coating*)



**Superaliages =  
super espace de recherche**

hydrogen 1 H 1.0079	beryllium 4 Be 9.0122															helium 2 He 4.0026
lithium 3 Li 6.941	magnesium 12 Mg 24.306															
sodium 11 Na 22.990	calcium 20 Ca 40.078															
potassium 19 K 39.098	scandium 21 Sc 44.956															
rubidium 37 Rb 85.468	titanium 22 Ti 47.867															
cesium 55 Cs 132.91	vanadium 23 V 50.942															
francium 87 Fr [223]	chromium 24 Cr 51.996															
	manganese 25 Mn 54.938															
	iron 26 Fe 55.845															
	cobalt 27 Co 58.933															
	nickel 28 Ni 58.693															
	copper 29 Cu 63.546															
	zinc 30 Zn 65.39															
	gallium 31 Ga 69.723															
	germanium 32 Ge 72.61															
	arsenic 33 As 74.922															
	selenium 34 Se 78.96															
	bromine 35 Br 79.904															
	krypton 36 Kr 83.80															
	rubidium 37 Rb 85.468															
	strontium 38 Sr 87.62															
	yttrium 39 Y 88.906															
	zirconium 40 Zr 91.224															
	niobium 41 Nb 92.906															
	molybdenum 42 Mo 95.94															
	technetium 43 Tc [98]															
	ruthenium 44 Ru 101.07															
	rhodium 45 Rh 102.91															
	palladium 46 Pd 106.42															
	silver 47 Ag 107.87															
	cadmium 48 Cd 112.41															
	indium 49 In 114.82															
	tin 50 Sn 118.71															
	antimony 51 Sb 121.76															
	tellurium 52 Te 127.60															
	iodine 53 I 126.90															
	xenon 54 Xe 131.29															
	barium 56 Ba 137.33															
	lanthanum 57-70 Lu 174.97															
	hafnium 72 Hf 178.49															
	tantalum 73 Ta 180.95															
	tungsten 74 W 183.84															
	rhenium 75 Re 186.21															
	osmium 76 Os 190.23															
	iridium 77 Ir 192.22															
	platinum 78 Pt 195.08															
	gold 79 Au 196.97															
	mercury 80 Hg 200.59															
	thallium 81 Tl 204.38															
	lead 82 Pb 207.2															
	bismuth 83 Bi 208.98															
	polonium 84 Po [209]															
	astatine 85 At [210]															
	radon 86 Rn [222]															
	actinium 89-102 Lr [260]															
	rutherfordium 104 Rf [261]															
	dubnium 105 Db [262]															
	seaborgium 106 Sg [266]															
	bohrium 107 Bh [264]															
	hassium 108 Hs [265]															
	meitnerium 109 Mt [268]															
	darmstadtium 110 Uun [271]															
	roentgenium 111 Uuu [272]															
	unbinilium 112 Uub [277]															
	unquadium 114 Uuq [289]															



Bases



Renforcement par solution solide



Renforcement par précipitation



Renforcement des joints de grains



Renforcement environnemental



Autres

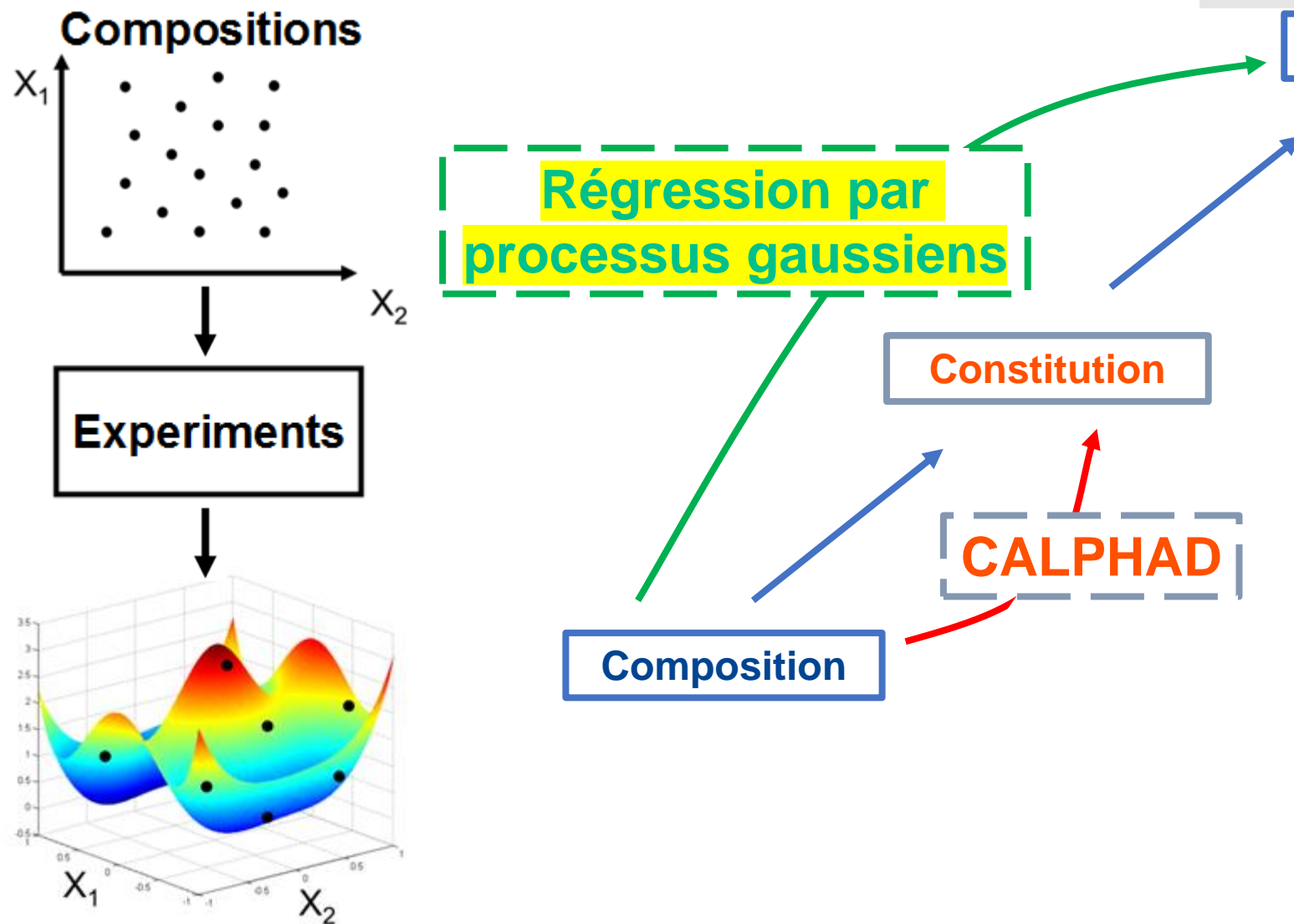
>>  $10^{15}$  alliages  
(précision 0.1 %)

<  $10^6$  alliages évalués  
(0.0000001 %)

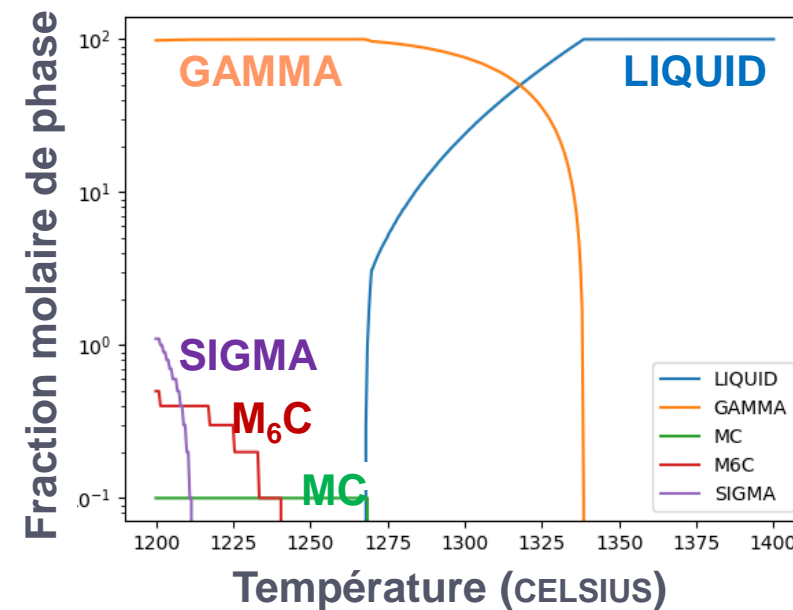
⇒ Une marge d'amélioration existe !



# Métallurgie combinatoire : la stratégie de conception



**CALPHAD ne permet la prédiction 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)

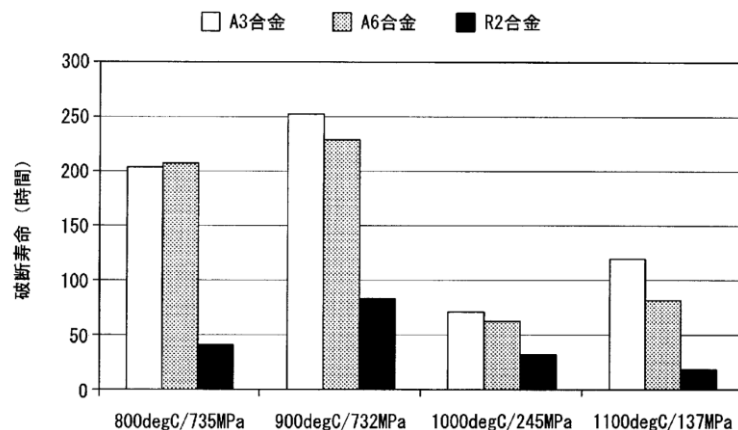


Таблица 1. Составы предлагаемого сплава и прототипа.										
№ сплава	Содержание элементов, мас. %									
	Al	Cr	W	Mo	Ti	C	Sn	Zr	La	Ni
I	7,8	5,0	4,0	3,0	0,8	0,001	-	0,5	0,016	Осн
II	8,4	5,7	3,3	3,5	1,2	0,01	-	0,24	0,10	Осн
III	9,0	6,5	2,7	4,0	1,5	0,02	-	0,05	0,25	Осн
Прототип	8,5	5,7	3,2	3,5	1,2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

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

Таблица 2. Свойства предлагаемого сплава на основе интерметаллида Ni <sub>3</sub> Al и сплава-прототипа.				
Свойства	I	II	III	Прототип
Привес образцов при окислении на воздухе за 100 ч при температуре 1200°C, г/м <sup>2</sup>	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 <sup>3</sup>	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

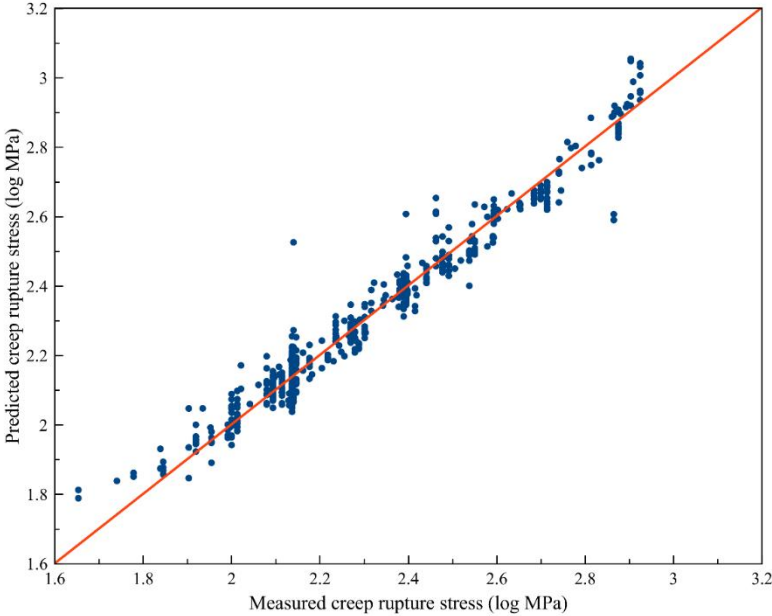


ID	LAR/HAB (Degrees)	TEST CONDITION	RUPTURE LIFE HRS	ELONG., %	RA, %	Time to 1%	Time to 2%
257-5	8.7	1800F/25.0 ksi	712.5	40.4	21.5	262.1	349.1
270-4	10.1	1800F/25.0 ksi	739.7	40.8	35.0	283.6	377.5
270-8	10.0	1800F/25.0 ksi	810.8	39.6	49.0	325.8	423.7
260-1	11.9	1800F/25.0 ksi	604.8	19.6	17.4	233.9	321.3
260-5	11.9	1800F/25.0 ksi	609.1	11.9	14.9	266.9	366.2
275-7	13.8	1800F/25.0 ksi	551.6	10.3	8.9	264.9	357.5
275-3	13.8	1800F/25.0 ksi	548.5	10.2	11.5	245.2	332.8
265-1	18.1	1800F/25.0 ksi	1.0**	0.9	1.0		
265-5	18.1	1800F/25.0 ksi	693.2	47.9	32.1	248.3	340.6
1742							
1741							
264-2	4.7	1800F/30.0 ksi	318.2	37.1	31.6	99.4	131.0
264-5	4.7	1800F/30.0 ksi	317.7	36.1	46.0	102.7	144.3
267-2							
270-7	10.0	1800F/30.0 ksi	381.9	35.6	36.1	155.7	200.5
260-2	11.9	1800F/30.0 ksi	273.0	13.4	13.6	107.0	149.3
260-6	11.9	1800F/30.0 ksi	273.6	13.1	13.7	113.7	151.2
275-4	13.8	1800F/30.0 ksi	244.1	7.6	8.1	114.8	155.0
275-8	13.8	1800F/30.0 ksi	281.7	16.1	19.0	99.9	152.5
265-2	18.1	1800F/30.0 ksi	190.6	3.8	3.5	126.3	171.1
265-6	18.1	1800F/30.0 ksi	270.1	5.8	5.7	155.0	202.4
A722	SX-long	1800F/36.0 ksi	143.0	35.7	48.1	48.0	66.3
K720	SX-long	1800F/36.0 ksi	138.3	46.1	47.0	42.9	61.0
264-1	4.7	1800F/36.0 ksi	136.4	40.3	47.5	38.5	56.2
264-4	4.7	1800F/36.0 ksi	141.1	49.0	46.8	43.1	60.8
258-4	7.7	1800F/36.0 ksi	141.5	22.9	34.3	42.9	62.9
258-8	7.7	1800F/36.0 ksi	141.3	28.8	29.8	42.5	60.6
270-1	10.0	1800F/36.0 ksi	133.4	34.4	47.7	43.4	61.5
270-5	10.0	1800F/36.0 ksi	152.5	45.1	45.0	30.1	70.0
264-3	11.9	1800F/36.0 ksi	128.1	36.7	33.9	34.4	53.4
272-5	14.4	1800F/36.0 ksi	107.4	6.5	14.5	36.1	51.5
272-3	14.4	1800F/36.0 ksi	117.6	14.7	13.8	42.5	60.3
272-7			123.7	10.7	14.2	34.0	73.3
276-3	6.9	1900F/15.5 ksi	931.9	11.5	16.2	448.7	614.4
728-7			109.7			48.5	
263-1			84.8			55.3	
263-5			87			57.5	
268-3	10.1	1900F/15.5 ksi	1096.8	11.0	13.3	531.4	763.0
268-7	10.1	1900F/15.5 ksi	1177.8	7.2	8.9	584.5	855.0
256-1	12.3	1900F/15.5 ksi	887.3	8.7	8.2	483.5	619.8
256-3	12.3	1900F/15.5 ksi	840.2	7.4	7.3	437.1	618.5
272-2	14.4	1900F/15.5 ksi	1019.2	9.9	13.1	492.7	723.0
272-5	14.4	1900F/15.5 ksi	894.6	7.8	5.2	330.0	636.5
278-3	22.1	1900F/15.5 ksi	763.5	3.9	3.5	501.2	683.8

Détermination des paramètres du modèle

Évaluation de la prédictivité  $\propto$  différence entre valeurs réelles et prédites

## Validation graphique



## 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

prédiction

## Autres bases de données

Base de données		# lignes	# alliages
Fluage	t <sub>r</sub>	1963	612
	t <sub>1</sub>	554	141
	t <sub>2</sub>	292	58
	DR	593	184
	RAR	385	102
Traction	R <sub>m</sub> (SX)	214	116
	R <sub>m</sub> (SX + PX)	2249	403
	R <sub>e</sub> (SX)	135	39
	R <sub>e</sub> (SX + PX)	2096	299
	DR	99	22
	RAR	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.

CALPHAD {

• résistance à la corrosion (Al, Cr)<sub>γ</sub> à 1200°C

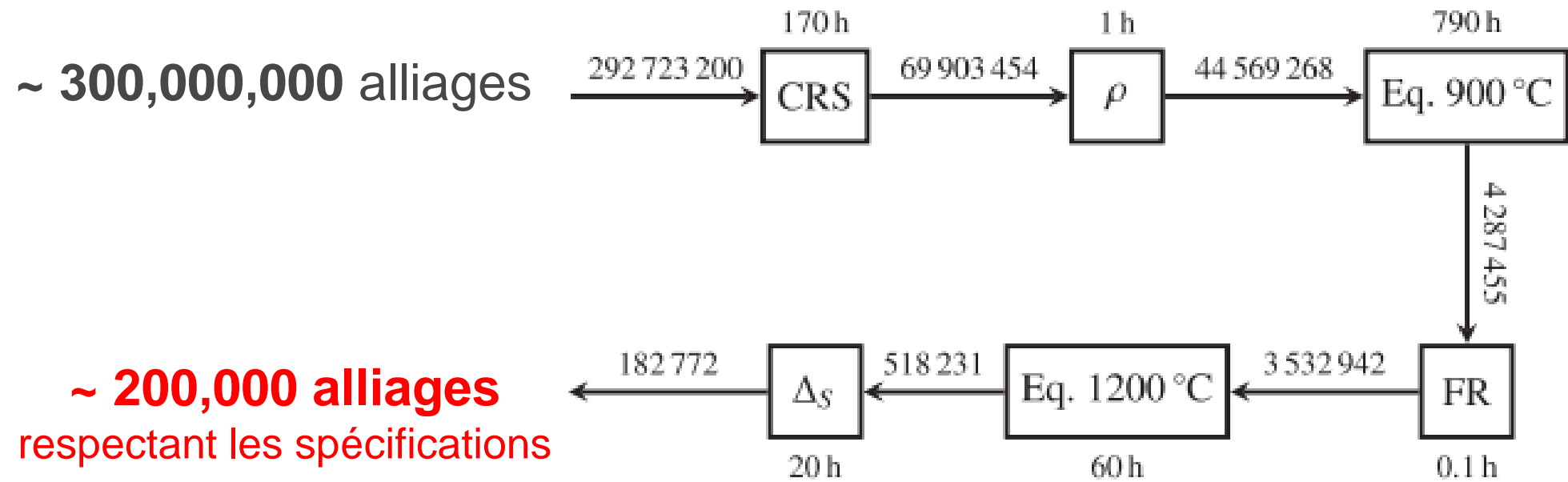
300, 200, 150 and 55 MPa

• 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**



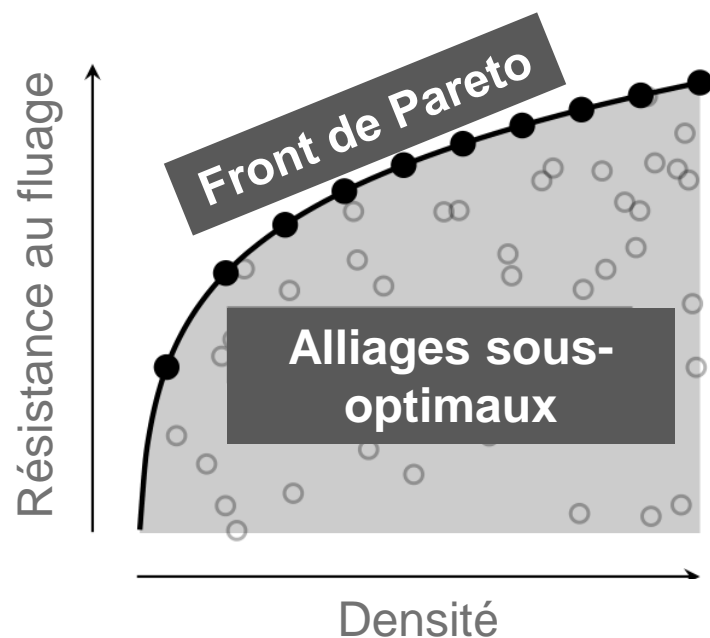
**Fig. 2.** Sequence of calculation steps. Each box represents a calculation (see text for details). The approximate time taken to perform each calculation is associated with their respective box, with the number of alloys that pass the previous criterion indicated between each step.

# Sélection des alliages optimaux (force brute)

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

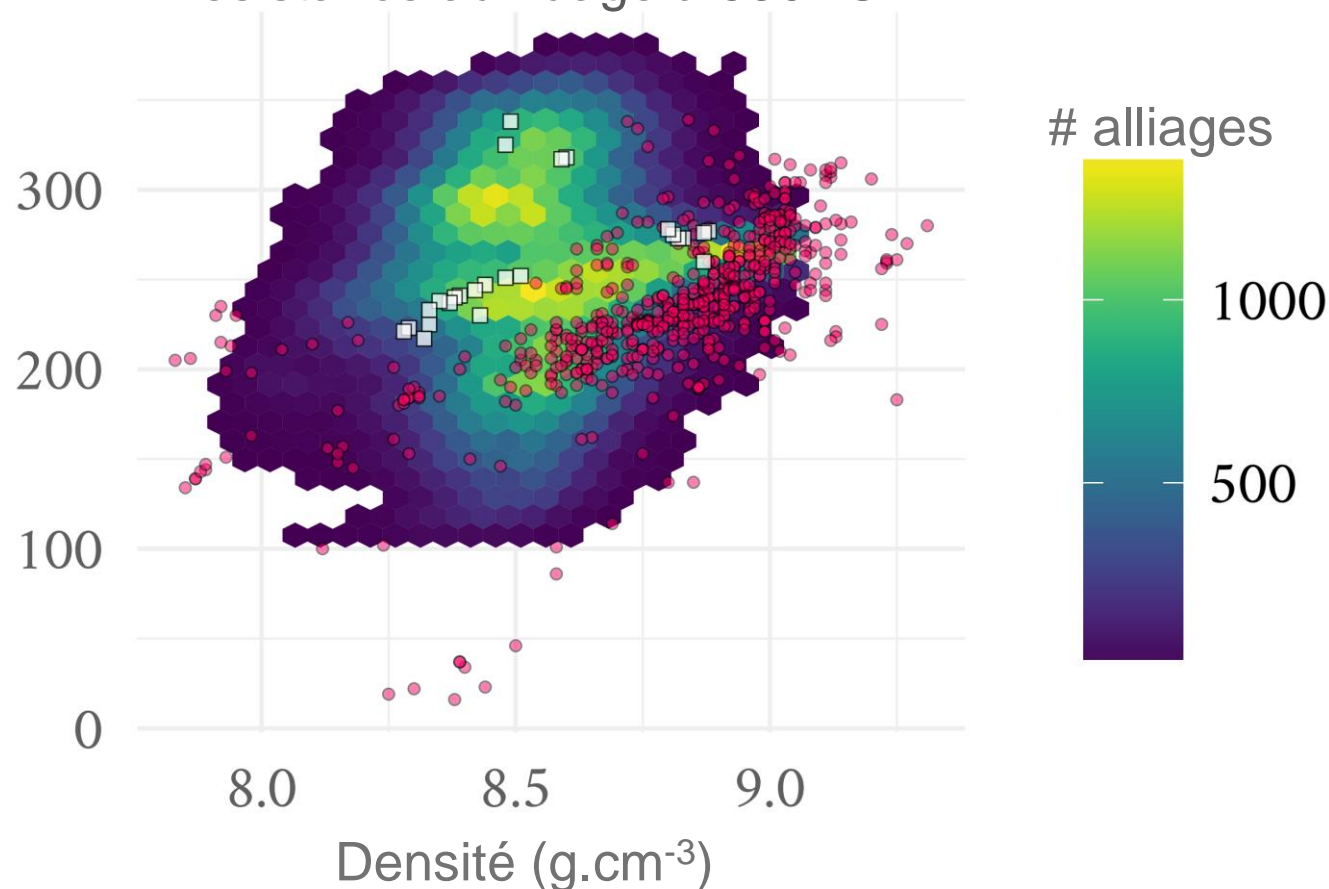
25 superalliages monocristallins haute performance et brevetables

**Tri de non-domination**  
selon les propriétés spécifiques



**325 alliages restants**  
(réduction de 99.999 % de l'espace)

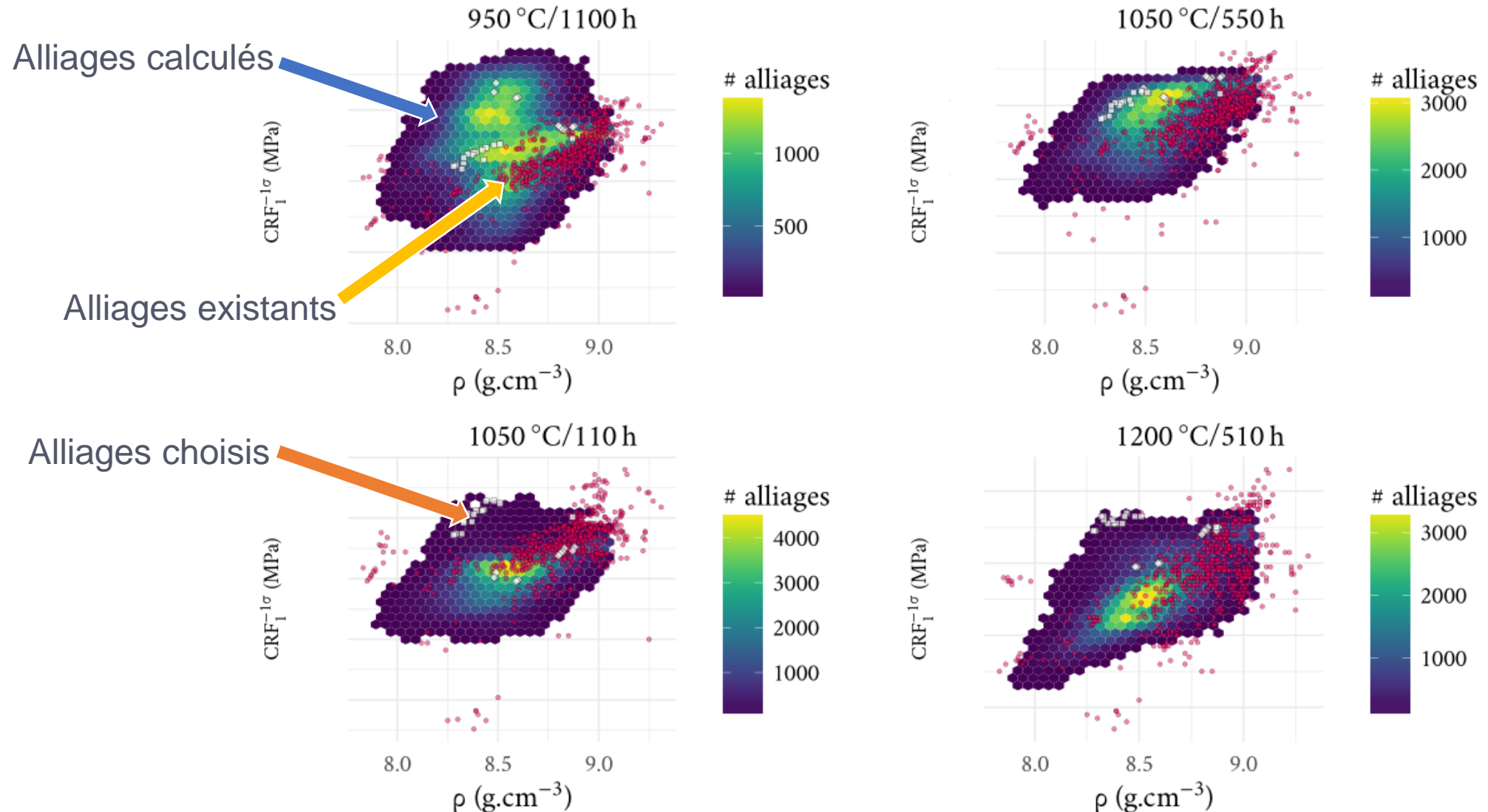
Résistance au fluage à 950 °C



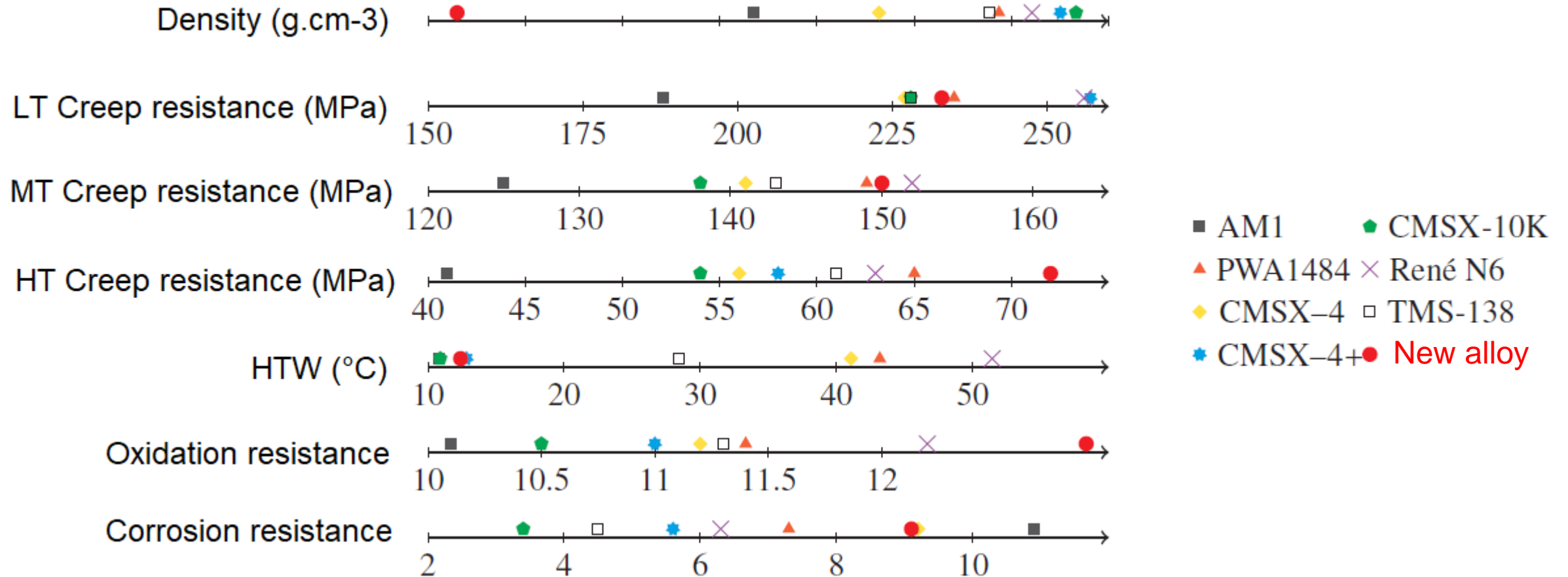


# Contrainte de rupture par fluage prédites à 4 couples température / temps

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

### Design specifications for power plants applications

**CALPHAD**

optimisation objectives

**Thermo-Calc**

microstructural assessment

**Stable constitution:** only  $\gamma$ ,  $\gamma'$  and  $M_{23}C_6$  (no TCP,  $\eta$ ,  $\delta$ ...)

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

Good **fabricability** and **weldability**: capped **mol-%  $\gamma'$**

**Gaussian processes**

property estimation

Good **high temperature strength**: **UTS, YS and CRS**  $\nearrow$

**$\gamma'$  stability**: lattice misfit  $\delta \searrow$

**Affordability**: heat cost  $\searrow$



*Disc Alloys*



# Combinatory Metallurgy

## Example with use of Genetics Algorithms

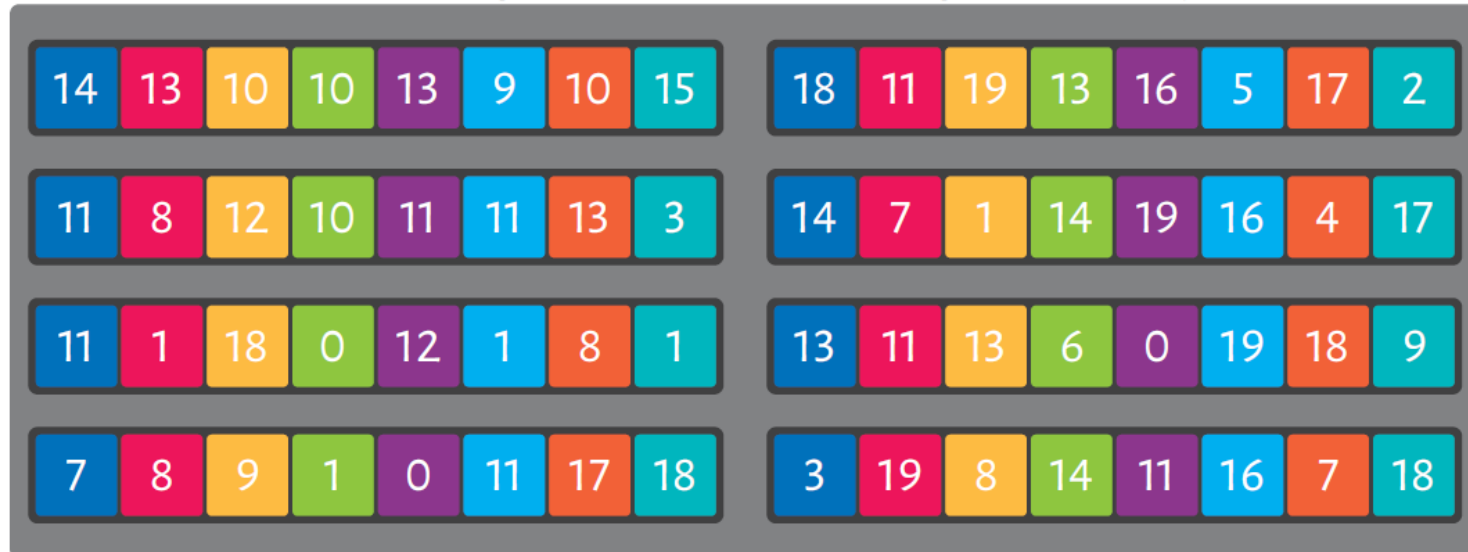
1 alloying element = **1 gene**

Cr

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



**Population** = group of individuals = group of alloys

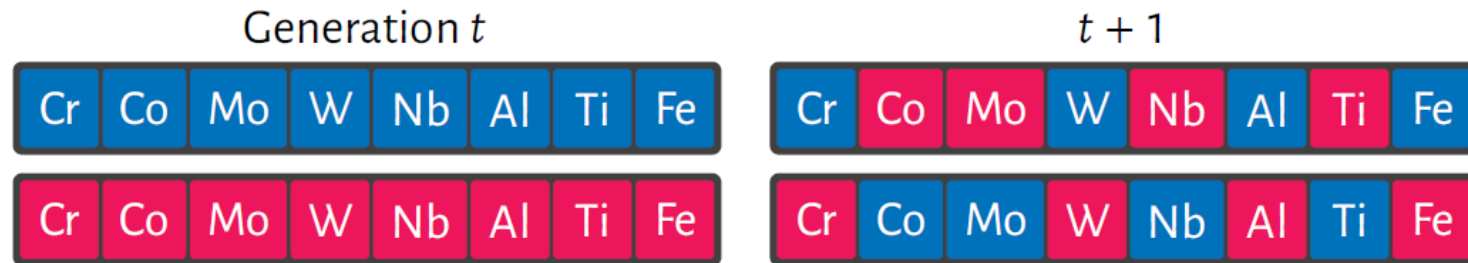


*From PhD thesis E.Menou  
(2016, Polytech Nantes)*

# 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



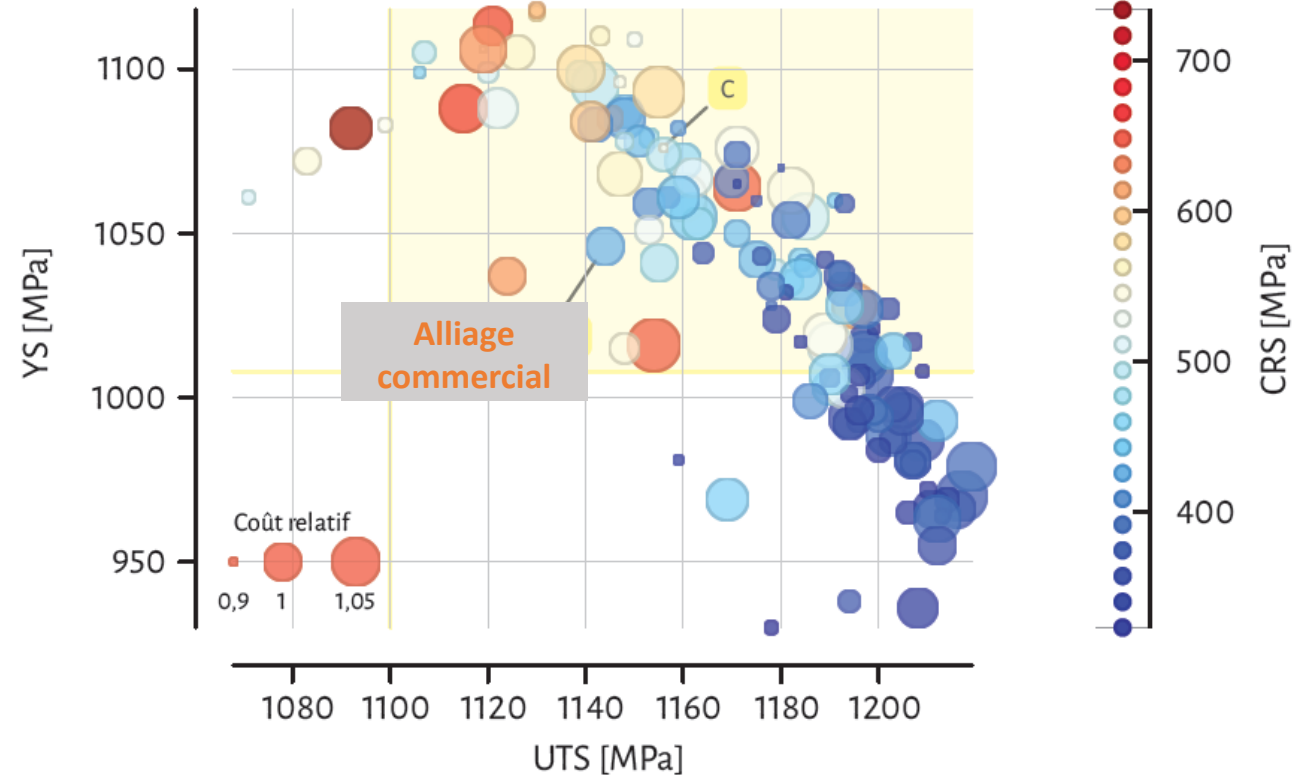
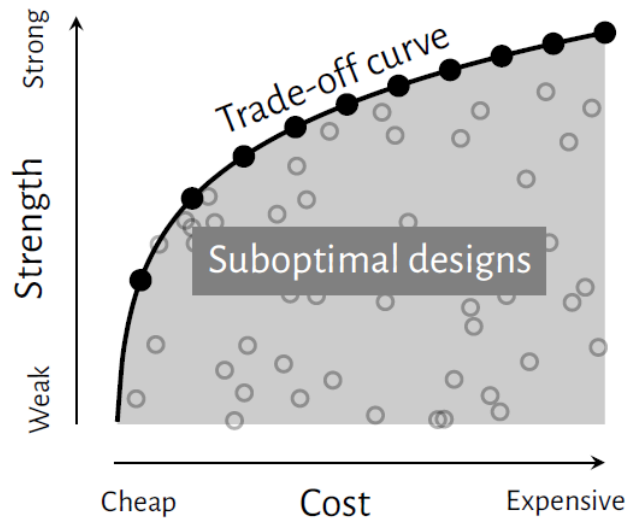
*From PhD thesis E.Menou (2016, Polytech Nantes)*

# 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 x4 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.

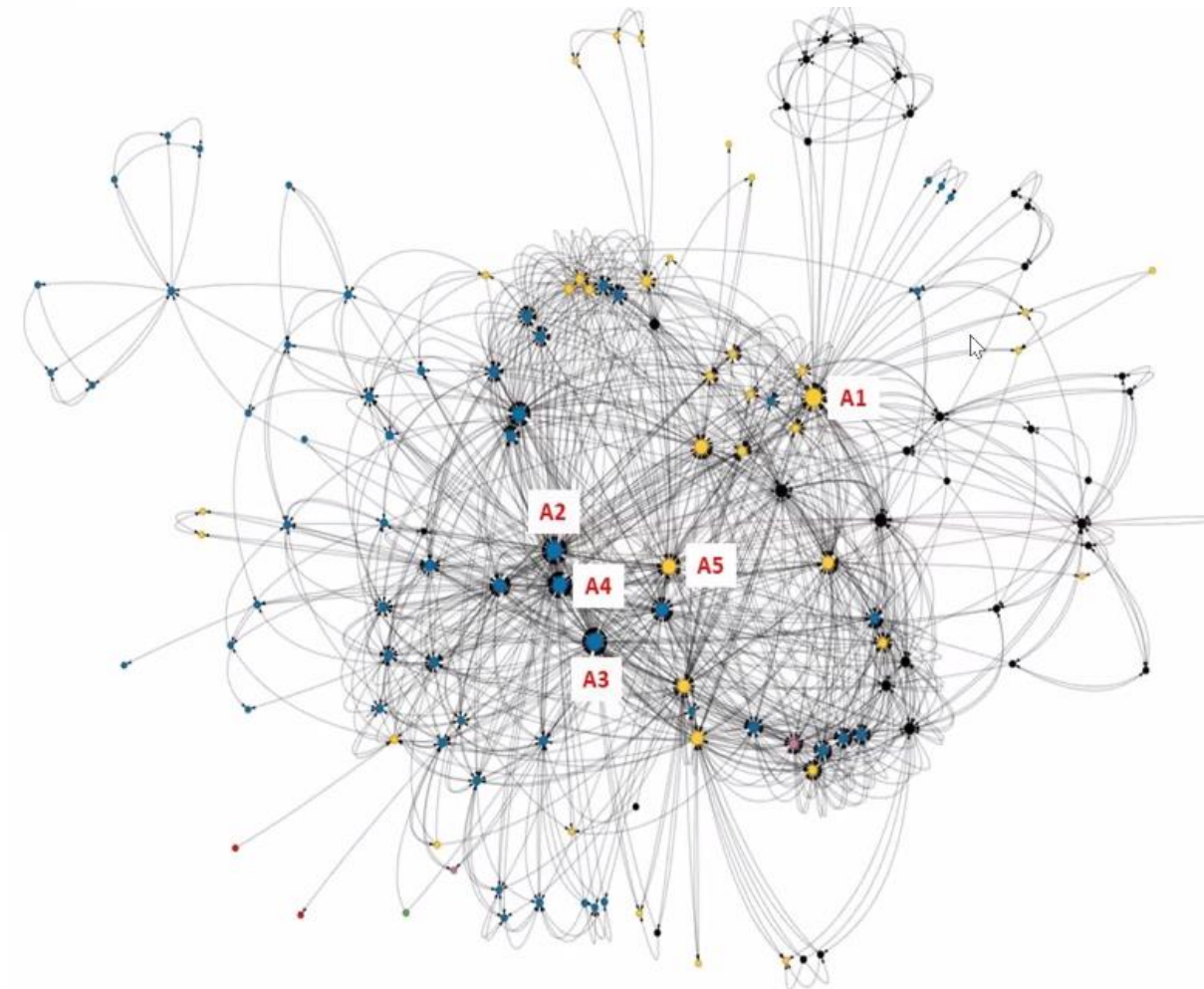
NaCl-KCl-MgCl <sub>2</sub>	Alloy i	Alloy j	Score (mi/mj)
	SS316	Hastelloy C276	2.27
	SS316	Inconel 625	3.55
LiF-Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> -K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	Hastelloy C276	Inconel 625	1.57
	SS316	Hastelloy C276	3.16
	SS316	Inconel 625	25.28
	Hastelloy C276	Inconel 625	8

### 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 « *buisness model* »

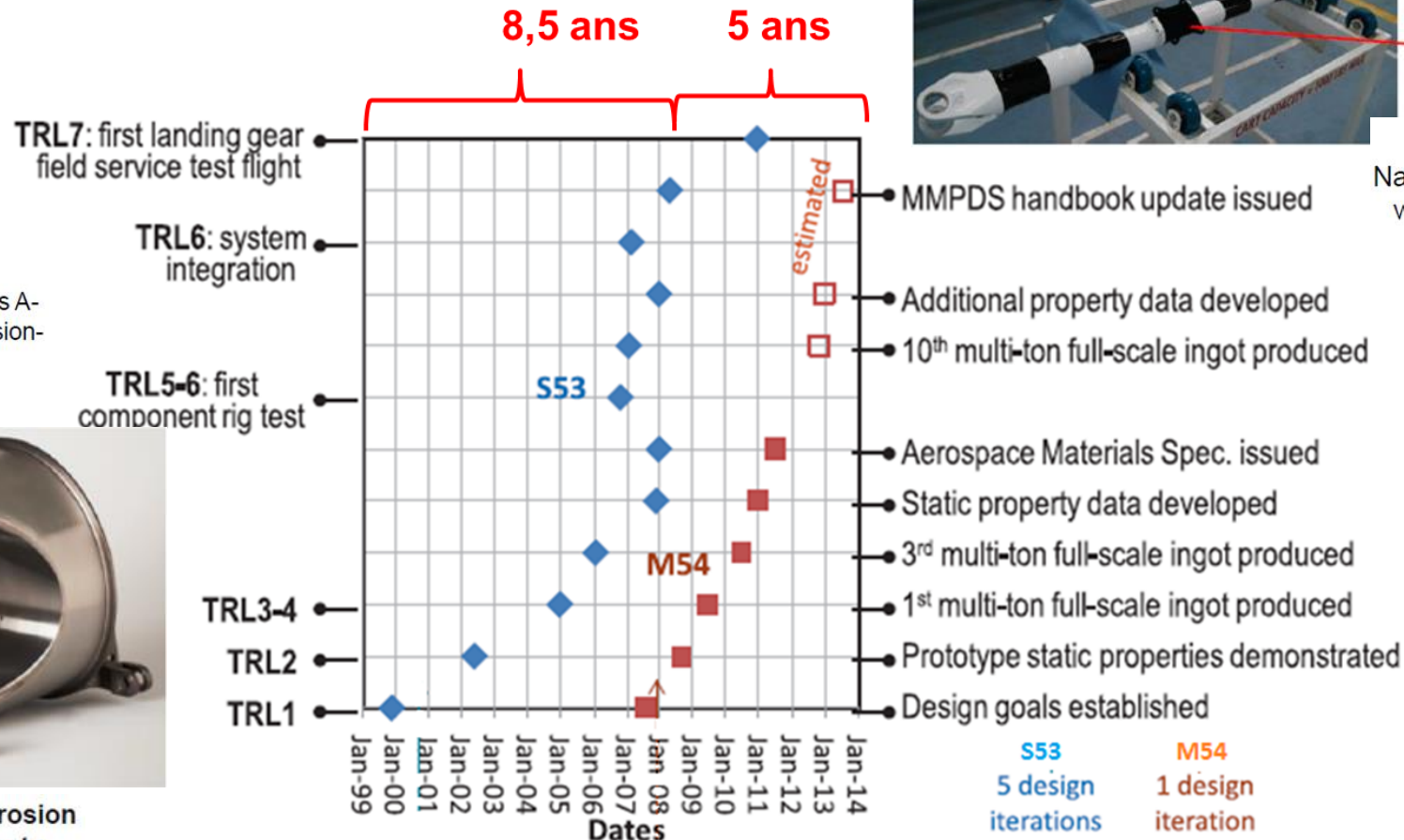


Questek Innovation, Northwestern University "spin-off"  
Founded in 1997 by Greg Olson & Ray Genellie

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
<b>ABD-1</b>	<b>5.8</b>	<b>8</b>	<b>10</b>	-	<b>1.6</b>	-	<b>8.5</b>	-	<b>8.5</b>	-
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
<b>ABD-2</b>	<b>6.4</b>	<b>4</b>	<b>9</b>	-	<b>5.6</b>	<b>2.6</b>	<b>7.4</b>	-	<b>5.6</b>	-
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
<b>ABD-3</b>	<b>5.4</b>	<b>13</b>	<b>10</b>	-	-	-	<b>5</b>	-	<b>7</b>	-
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 2<sup>nd</sup> Gen Creep

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

### ABD-2: 4<sup>th</sup> 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

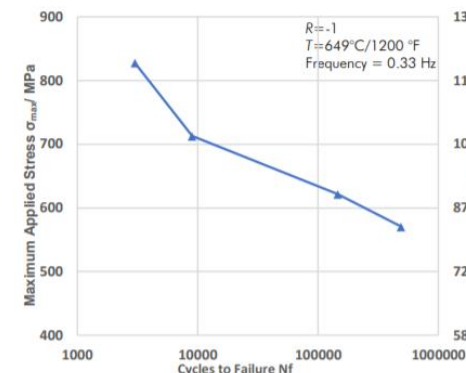
**Licence A&D Septembre 2019**



**Pearl<sup>®</sup> Micro ABD<sup>®</sup>-900AM**

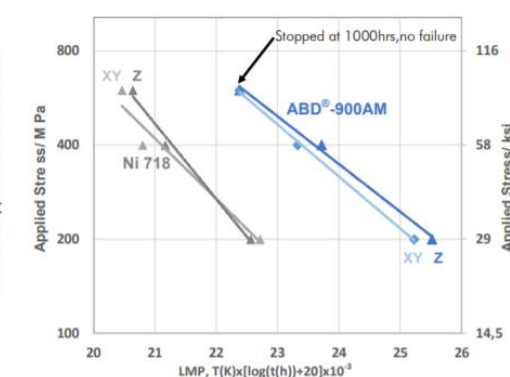
**Powder for Additive Manufacturing**

### FATIGUE PROPERTIES



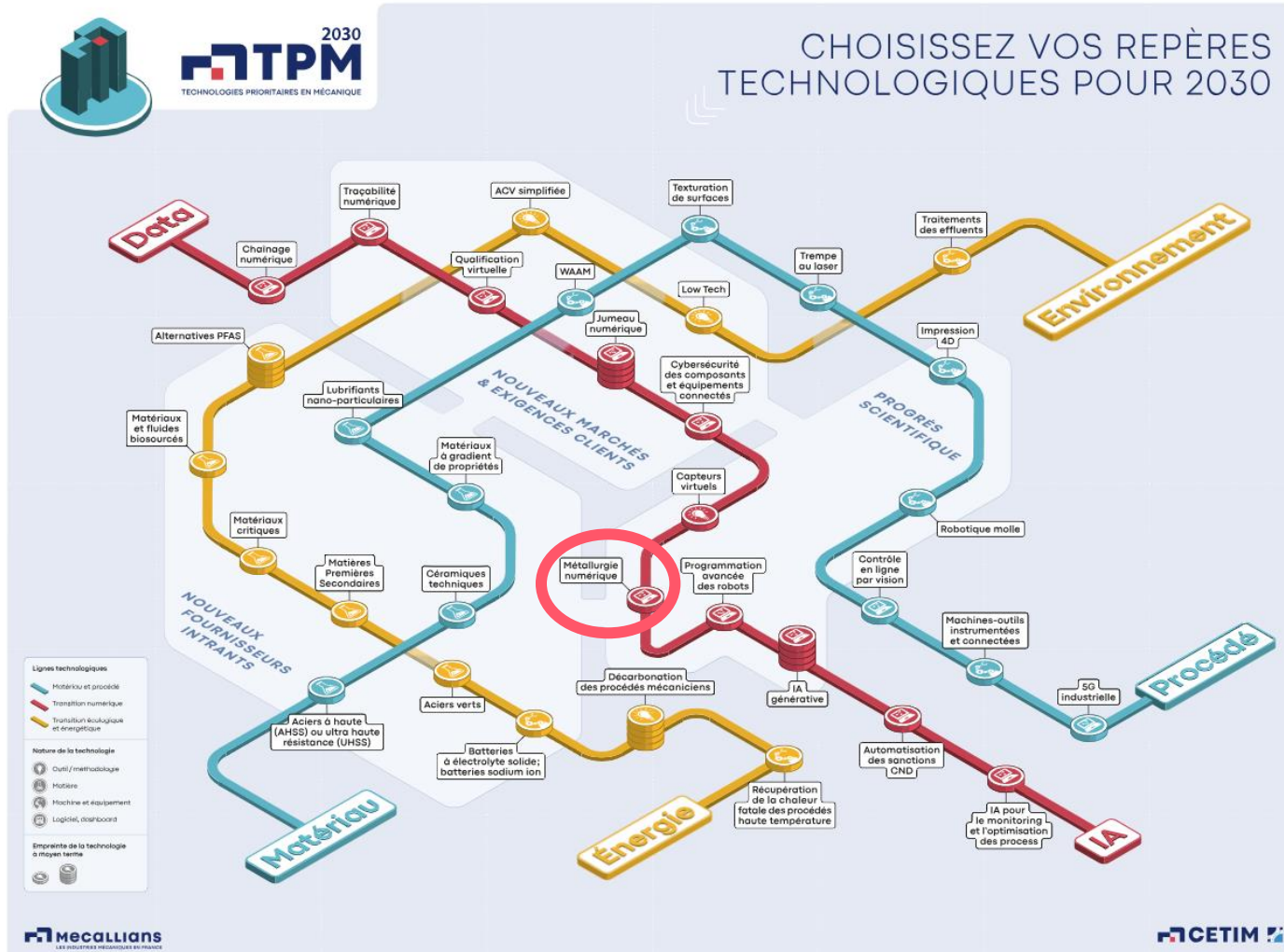
Low cycle fatigue properties of additively manufactured ABD<sup>®</sup>-900AM after full heat treatment cycle. Tested in accordance to ASTM E606.

### STRESS RUPTURE PROPERTIES



Stress rupture properties of additively manufactured ABD<sup>®</sup>-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 méta-modèle**



# Conclusions et Perspectives

Les principaux modèles qui peuvent être utilisés

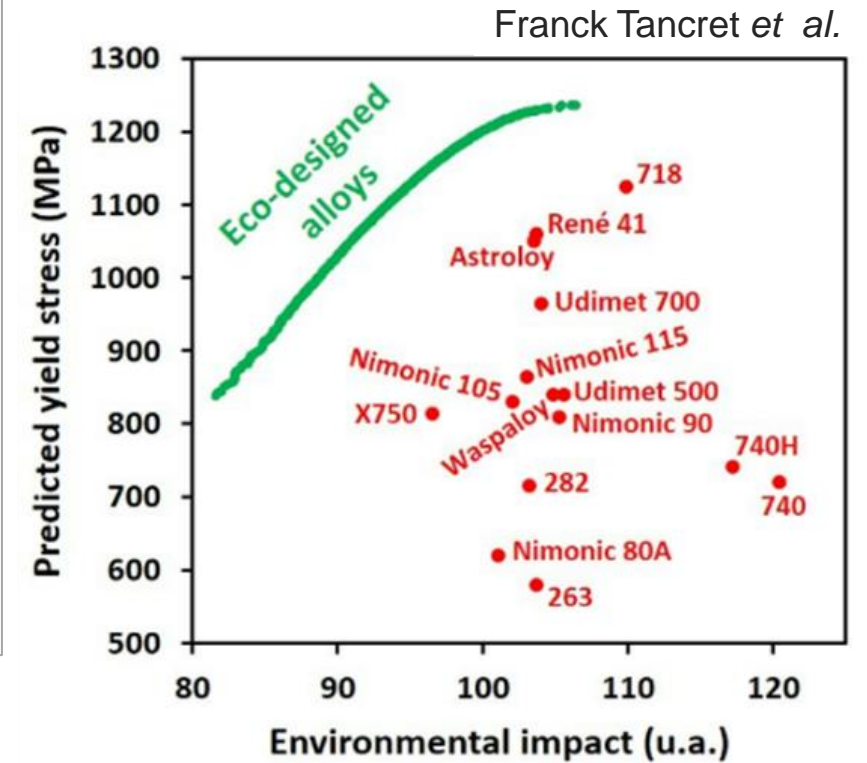
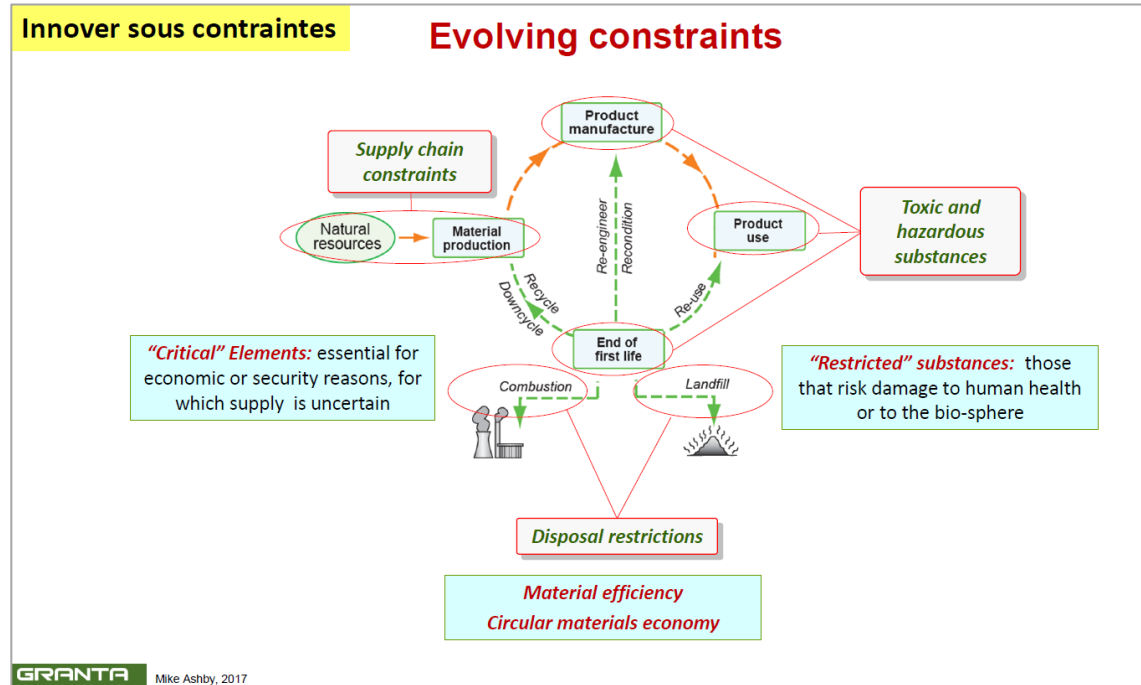
- i) Les modèles pouvant être mis en équation « simplement ». C'est par exemple le cas du coût des éléments d'alliages ou de la densité, mais on peut aussi trouver des modèles de « métallurgie physique » pour certaines propriétés [cf. Reed *et al.*].
- ii) Les prédictions issues de logiciels de thermodynamique 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

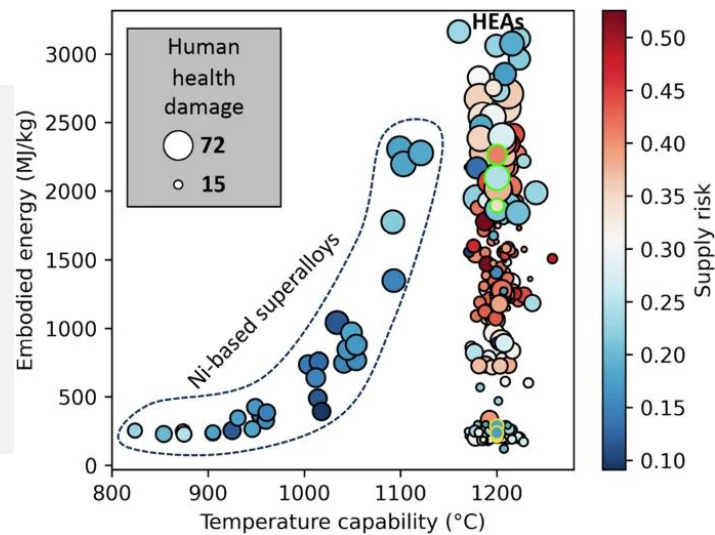
Nouveau réseau ISAS (RITMIC) autour de la thématique .

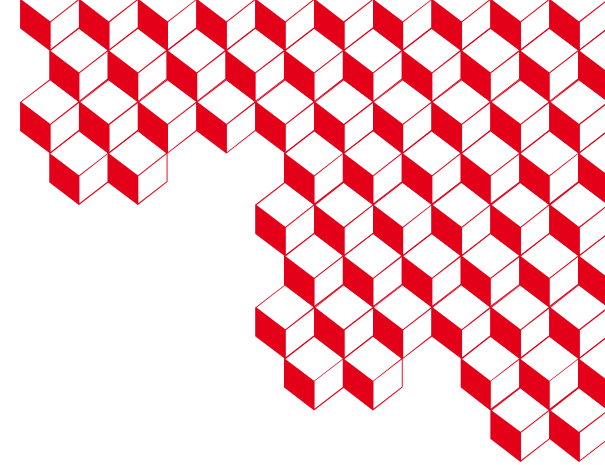
# De nouveaux critères de Design....



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

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>





# 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](mailto: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>