

Thèse de Doctorat

Edern MENOUE

*Mémoire présenté en vue de l'obtention du
grade de Docteur de l'Université de Nantes
sous le sceau de l'Université Bretagne Loire*

École doctorale : matière, molécules et matériaux en Pays de la Loire

Discipline : génie des matériaux

Unités de recherche : IMN UMR 6502 & LINA UMR 6241

Soutenue le 19 octobre 2016

**Conception d'alliages par optimisation combinatoire multiobjectifs :
thermodynamique prédictive, fouille de données, algorithmes génétiques et analyse décisionnelle**

JURY

- Présidente : **Pascale KUNTZ**, Professeur des Universités, Université de Nantes
- Rapporteurs : **Laetitia JOURDAN**, Professeur des Universités, Université de Lille 1
Jacques LACAZE, Directeur de recherche, CIRIMAT, Toulouse
- Examineurs : **Anna FRACZKIEWICZ**, Directeur de recherche, LGF, Saint-Étienne
Jacques BELLUS, Ingénieur R&D, Aubert & Duval, Les Anzices
- Directeur de thèse : **Franck TANCRET**, Professeur des Universités, Université de Nantes
- Co-directeur de thèse : **Gérard RAMSTEIN**, Maître de Conférences HDR, Université de Nantes
- Co-encadrant de thèse : **Emmanuel BERTRAND**, Maître de Conférences, Université de Nantes

Sommaire

Remerciements	v
Liste des figures	vii
Listes des tableaux	x
Liste des critères de conception	xiii
Préambule	1
1 Introduction	3
Références	10
2 Outils de conception d'alliages	15
2.1 Thermodynamique prédictive	16
2.1.1 L'approche CALPHAD	18
2.1.2 CALPHAD pour la conception d'alliages	20
2.1.3 Bases de données thermodynamiques	22
2.1.4 Synthèse	23
2.2 Fouille de données pour la prédiction de caractéristiques d'alliages	24
2.2.1 Réseaux de neurones artificiels	25
2.2.2 Programmation génétique	29
2.2.3 Régression par machine à vecteurs de support	31
2.2.4 Processus gaussiens	32
2.2.5 Synthèse	36
2.3 Algorithmes génétiques et analyse décisionnelle	38
2.3.1 Algorithmes génétiques : généralités	39
2.3.2 Les algorithmes génétiques pour la conception d'alliages	41
2.3.3 L'algorithme génétique de tri de non-domination	44
2.3.4 Aide à la décision multicritères	48
2.3.5 Synthèse	51
Références	51
3 Conception de superalliages à base de nickel	63
3.1 Introduction	65
3.2 Critères de conception exploitant la thermodynamique prédictive	65
3.2.1 Rôle des éléments d'alliage	66
3.2.2 Origine et influence des phases	67
3.2.3 Les méthodes PHACOMP et NEW PHACOMP	70

3.2.4	Soudabilité des superalliages	71
3.2.5	Forgeabilité des superalliages	75
3.2.6	Protection contre l'oxydation et la corrosion	76
3.3	Critères de conception exploitant la fouille de données	77
3.3.1	Procédures d'apprentissage et de validation des modèles	79
3.3.2	Résistance à la traction et limite d'élasticité	80
3.3.3	Contrainte de rupture par fluage	87
3.3.4	Paramètre de maille de la phase γ	92
3.3.5	Paramètre de maille de la phase γ'	95
3.4	Résumé des critères de conception de superalliages	98
3.5	Adaptation de l'algorithme génétique	99
3.5.1	Multiples instances	99
3.5.2	Contraintes comme objectifs	100
3.5.3	Paramétrage de l'algorithme	101
3.5.4	Économies d'évaluations	101
3.5.5	Métriques	102
3.6	Optimisation sans aide à la décision : cas illustratif	102
3.6.1	Espace de recherche	103
3.6.2	Objectifs et contraintes	103
3.6.3	Résultats	106
3.7	Optimisation sans aide à la décision : cas industriel	110
3.7.1	Espace de recherche	110
3.7.2	Objectifs et contraintes	110
3.7.3	Résultats	113
3.7.4	Sélection d'alliages pour fabrication	115
3.7.5	Résultats préliminaires de la validation expérimentale	115
3.8	Optimisation avec aide à la décision <i>a posteriori</i>	118
3.8.1	Espace de recherche	118
3.8.2	Objectifs et contraintes	118
3.8.3	Résultats	119
3.8.4	Performances de l'algorithme	123
3.8.5	Sélection multicritères manuelle	125
3.9	Sélection à l'aide de l'analyse décisionnelle multicritères	130
3.9.1	Choix d'une alternative globale	131
3.9.2	Choix d'une alternative orientée vers la résistance au fluage	134
3.10	Analyse de la sensibilité des compositions optimales proposées	138
3.11	Synthèse	140
	Références	140
4	Conception d'alliages à forte entropie	145
4.1	Principe et intérêts des alliages à forte entropie	147
4.2	Critères de conception	149
4.2.1	Critères physicochimiques	149
4.2.2	Critère P_I	154
4.2.3	Critère P_F	155
4.2.4	Thermodynamique prédictive	156
4.2.5	Critère utilisé dans cette étude : critère P_{IF}	158
4.2.6	Autres critères de conception	160
4.3	Adaptation de l'algorithme génétique	160

4.3.1	Utilisation d'une population initiale partiellement déterministe	160
4.3.2	Régénération régulière de la population	161
4.3.3	Aspect combinatoire	162
4.3.4	Opérateur de mutation	165
4.3.5	Injection de cas	165
4.3.6	Autres paramètres de l'algorithme génétique	166
4.4	Optimisation d'alliages à forte entropie	166
4.4.1	Espace de recherche	166
4.4.2	Objectifs	166
4.4.3	Résultats	167
4.4.4	Confrontation des résultats avec la thermodynamique prédictive	171
4.4.5	Sélection d'alliages pour fabrication	176
4.5	Optimisation d'alliages à forte entropie de structure CFC	177
4.5.1	Résultats	178
4.5.2	Confrontation des résultats avec la thermodynamique prédictive	182
4.5.3	Sélection d'alliages CFC pour fabrication	187
4.6	Résultats préliminaires de la validation expérimentale	187
4.6.1	HEA CC 1	187
4.6.2	HEA CC 2	189
4.6.3	HEA CC 3	190
4.6.4	HEA CC 4	191
4.6.5	HEA CFC 1	193
4.6.6	HEA CFC 2	194
4.6.7	HEA CFC 3	197
4.6.8	Résumé des résultats	199
4.7	Synthèse	200
	Références	201
5	Conclusions et perspectives	205
	Références	210
A	Base de données d'apprentissage (R_m, R_e et CRF)	213
	Bibliographie	221

Remerciements

Ce manuscrit représente l'aboutissement de trois ans de travail qui n'aurait jamais pu être accompli sans l'accompagnement sans faille et les précieux conseils de mes encadrants. Je suis reconnaissant envers Franck Tancret, Gérard Ramstein, Emmanuel Bertrand et Philippe Leray pour m'avoir initié au très large champ de la « métallurgie combinatoire » et à ses multiples facettes. Je les remercie d'avoir patiemment partagé leur savoir-faire respectif en métallurgie et en sciences informatiques — à cet égard, je les remercie également de s'être souvent aventurés « en terre inconnue » et d'avoir « joué le jeu » de l'interdisciplinarité pour pouvoir m'assister au mieux. À Emmanuel : si, si, tu m'as vraiment aidé du côté informatique!

Je remercie Laetitia Jourdan et Jacques Lacaze de s'être attaqué à ce manuscrit entremêlant métallurgie et sciences informatiques et d'avoir eu la patience de comprendre les tenants et les aboutissants des deux côtés. Je remercie également Pascale Kuntz d'avoir suivi le déroulement de ma thèse et d'en avoir présidé la soutenance, ainsi qu'Anna Fraczkiewicz pour avoir accepté de participer au jury.

Je remercie l'entreprise Aubert & Duval et en particulier Coraline Crozet, Denis Béchet, Alexandre Devaux et Sylvain Puech pour leur aide dans la définition d'un cahier des charges industriel pour l'optimisation de superalliages à base de nickel, pour la fabrication de plusieurs nuances d'alliages optimisés ainsi que pour l'approvisionnement en superalliages divers. Je remercie tout autant Jacques Bellus d'avoir accepté de représenter l'entreprise au sein du jury.

Je remercie (encore une fois) Franck de m'avoir inondé de cahier des charges d'optimisation en collaboration avec plusieurs membres de l'équipe de Pedro Rivera du département de métallurgie de l'université de Cambridge, dont Isaac Toda-Caraballo et Enrique Nava-Galindo, envers qui je suis très reconnaissant. Je tiens en outre à remercier Pedro et les membres de son équipe pour leur chaleureux accueil lors de mon bref séjour à l'université de Cambridge, ainsi que pour leur « encadrement » tout aussi chaleureux au cours d'une semaine de conférence internationale.

L'excellente ambiance de travail à Polytech n'est certainement pas étrangère à la réussite de ce travail de thèse. Je crédite largement les membres permanents et non-permanents des équipes ID2M (les *métallos*) et ST2E (les *chimistes*) de l'institut des matériaux Jean Rouxel présents sur le site de la Chantrerie de maintenir cette ambiance joviale. Les membres permanents tels qu'Emmanuel, Franck (oh Franck), Laurence, Olivier, Pascal, René et Thierry sont les piliers de cette ambiance dont les non-permanents profitent et qu'ils entretiennent, ce qui montre qu'on peut bien rire ensemble tout en travaillant efficacement! Mes remerciements vont également à Anne-Lise, Camille, Marion, Mylène, Alex, Maître Giraudet et Fabrice, qui ont rendu, à leur façon, ce travail de thèse plus intéressant encore.

Je remercie (naïvement mais sérieusement) l'ensemble des équipes pédagogiques auxquelles je me suis frotté, de m'avoir donné envie de pousser aussi loin mes études et de m'avoir donné les clés

pour ouvrir les nombreux verrous rencontrés sur le chemin. Mes remerciements s'adressent particulièrement à Pascal Lucazeau, pour m'avoir appris à nuancer tout propos, ainsi qu'à l'équipe du département Matériaux de l'école polytechnique de l'université de Nantes.

Je remercie (mille fois!) ma famille pour m'avoir supporté dans tous les sens du terme. Sa présence a été le pendant humain de l'encadrement de Franck, Gérard, Emmanuel et Philippe, et sa disponibilité (ou sa *non-disponibilité* lors de la télé-rédaction de ce manuscrit) a grandement facilité mon travail de thèse.

Je remercie généralement les membres de toutes mes audiences d'avoir surmonté mes métaphores douteuses au cours de mes présentations. L'alliage, d'abord gâteau auprès de Gérard et Philippe, est ensuite devenu giraffe dans mes communications orales. Les mystères de la génétique...

Enfin, je retiendrai les propos de Mr. Lacaze notant mon écriture « qui rappelle le baroque en peinture », analogie qui a beaucoup amusé mon entourage me « reprochant » mon style ampoulé depuis de nombreuses années. Cette analogie a motivé la création d'un résumé graphique de ma thèse (figure 1) donnant un avant-goût — certes assez abstrait — de la suite!



Figure 1 — Résumé graphique de la thèse.

Liste des figures

1	Résumé graphique de la thèse	vi
1.1	Illustration du principe de la Pareto-optimalité	7
2.1	Différentes structures cristallines	16
2.2	Arrangements schématiques possibles d'atomes de deux espèces différentes	16
2.3	Exemple de microstructure	17
2.4	Diagramme de phases binaire argent-cuivre	18
2.5	Représentation graphique en réseau de la régression linéaire	25
2.6	Représentations de fonctions sigmoïdales	26
2.7	Somme de trois fonctions tangentes hyperboliques	26
2.8	Réseau de neurones artificiels de type perceptron multicouches	27
2.9	Évolution modélisée de la résistance à la traction d'un acier	28
2.10	Illustration du surapprentissage	29
2.11	Exemple d'une fonction générée par programmation génétique	30
2.12	Exemple de modèle généré par programmation génétique	30
2.13	Évolution modélisée de la limite d'élasticité d'un superalliage à base de nickel	35
2.14	Illustration du principe de la Pareto-optimalité	43
2.15	Fonctionnement schématique de NSGA-II pendant une génération	45
2.16	Calcul du front de non-dominance et de la distance de peuplement	46
2.17	Distribution de probabilité des enfants formés lors de la reproduction SBX	47
2.18	Fonction de préférence de type V	49
3.1	Représentation schématique de la formation d'une fissure à chaud	72
3.2	Principe du calcul de l'intervalle de solidification	73
3.3	Influence des teneurs en Al et en Ti sur la susceptibilité à la fissuration	75
3.4	Chrome libre en fonction de la teneur nominale en chrome	77
3.5	Répartition des compositions (bases de données R_m et R_e)	81
3.6	Répartition des mesures (bases de données R_m et R_e)	82
3.7	Valeurs prédites en fonction des valeurs mesurées (R_m)	84
3.8	Valeurs prédites en fonction des valeurs mesurées ($R_m^{-1\sigma}$)	84
3.9	Valeurs prédites en fonction des valeurs mesurées (R_e)	86
3.10	Valeurs prédites en fonction des valeurs mesurées ($R_e^{-1\sigma}$)	86
3.11	Répartition des mesures (base de données CRF)	87
3.12	Répartition des compositions (base de données CRF)	88
3.13	Évolution typique de CRF en fonction du paramètre de Larson-Miller	89
3.14	Valeurs prédites en fonction des valeurs mesurées (CRF)	91
3.15	Valeurs prédites en fonction des valeurs mesurées (CRF $^{-1\sigma}$)	91
3.16	Répartition des mesures (base de données a_γ)	92

3.17	Répartition des compositions (base de données a_γ)	93
3.18	Valeurs prédites en fonction des valeurs mesurées (a_γ)	95
3.19	Répartition des compositions (base de données $a_{\gamma'}$)	96
3.20	Répartition des mesures (base de données $a_{\gamma'}$)	97
3.21	Valeurs prédites en fonction des valeurs mesurées ($a_{\gamma'}$)	98
3.22	Fonctionnement schématique de l'algorithme d'optimisation	100
3.23	Organigramme simplifié d'évaluation des objectifs (cas illustratif)	105
3.24	Évolution du ratio d'amélioration relatif cumulé	106
3.25	Évolution de l'amélioration absolue cumulée	107
3.26	Ensemble de Pareto	107
3.27	Distribution de la teneur des neuf éléments optimisés	109
3.28	Organigramme d'évaluation des objectifs (cas AD730)	112
3.29	Évolution du ratio d'amélioration relatif cumulé	113
3.30	Distribution des éléments d'addition des alliages optimaux	114
3.31	Distribution des alliages optimaux en fonction des objectifs	115
3.32	Diffractogrammes des alliages ALT 730 I, II, III et AD730	117
3.33	Évolution du ratio d'amélioration relatif cumulé (cas réaliste)	119
3.34	Distribution des alliages optimaux en fonction des objectifs	120
3.35	Distribution des alliages optimaux en fonction de la valeur des contraintes	121
3.36	Distribution des éléments d'addition des alliages optimaux	122
3.37	Pourcentage d'individus non-dominés au sens de Pareto dans une population	123
3.38	Proportion de doublons dans la population	125
3.39	Principe de comparaison des alliages optimisés avec les alliages existants	126
3.40	Évolution prédite des propriétés en traction de l'ALT 740H	128
3.41	Évolution prédite des propriétés en fluage de l'ALT 740H	129
3.42	Évolution prédite des propriétés en traction et en fluage de l'ALT 263	130
3.43	Représentation « diamant PROMETHEE » (sélection généraliste)	132
3.44	Évolution prédite des propriétés en traction de l'ALT _{PROM GEN}	133
3.45	Évolution prédite des propriétés en fluage de l'ALT _{PROM GEN}	133
3.46	Représentation « diamant PROMETHEE » (sélection orientée CRF)	136
3.47	Évolution prédite des propriétés en traction de l'ALT _{PROM CRF}	137
3.48	Évolution prédite des propriétés en fluage de l'ALT _{PROM CRF}	137
3.49	Sensibilité des alliages sélectionnés aux variations de composition	139
4.1	Illustration de l'effet de distorsion d'une structure cubique centrée	148
4.2	Carte $\langle \delta, \Delta H_{\text{mix}} \rangle$ de Zhang <i>et al.</i> ²²¹	152
4.3	Carte $\langle \delta, \Delta \chi \rangle$ de Guo & Liu ²²⁵	153
4.4	Carte $\langle e/a, \text{VEC} \rangle$ de Poletti & Battezzati ²²⁷	153
4.5	Probabilité P_I des alliages de la base de données de HEA	155
4.6	Probabilité P_F des alliages de la base de données de HEA	156
4.7	Prédictions de la formation (ou non) d'un HEA selon CALPHAD	158
4.8	Prédictions de la formation (ou non) d'un HEA selon CALPHAD ($P_F > 0, 59$)	159
4.9	Illustration graphique de l'effet des réparations des HEA	165
4.10	Évolution du ratio d'amélioration (1 ^{er} cas HEA)	167
4.11	Ensemble de Pareto	168
4.12	Répartition des éléments dans les alliages optimaux	169
4.13	Écart à la composition équimolaire	170
4.14	Répartition des teneurs en éléments dans l'espace des objectifs	172
4.15	Plage de stabilité de la solution solide selon TCNI7	173

4.16	Plage de stabilité de la solution solide selon TTNI8	174
4.17	Plage de stabilité de la solution solide selon TCFE8	174
4.18	Plage de stabilité de la solution solide selon SSOL5	175
4.19	Pourcentage d'alliages optimaux prédits HEA	175
4.20	Pourcentage d'alliages optimaux prédits HEA	176
4.21	Évolution du ratio d'amélioration (2 ^e cas HEA)	178
4.22	Ensemble de Pareto	179
4.23	Comparaison des ensembles de Pareto HEA CC et HEA FCC	179
4.24	Répartition des éléments dans les alliages optimaux	181
4.25	Écart à la composition équimolaire	182
4.26	Répartition des teneurs en éléments dans l'espace des objectifs	183
4.27	Plage de stabilité de la solution solide selon TCNI7	184
4.28	Plage de stabilité de la solution solide selon TTNI8	184
4.29	Plage de stabilité de la solution solide selon TCFE8	185
4.30	Plage de stabilité de la solution solide selon SSOL5	185
4.31	Pourcentage d'alliages optimaux prédits HEA	186
4.32	Pourcentage d'alliages optimaux prédits HEA	186
4.33	Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 1	188
4.34	Diffractionogramme de l'alliage HEA CC 1	188
4.35	Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 2	189
4.36	Diffractionogramme de l'alliage HEA CC 2	190
4.37	Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 3	190
4.38	Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 3	191
4.39	Diffractionogramme de l'alliage HEA CC 3	191
4.40	Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 4	192
4.41	Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 4	192
4.42	Diffractionogramme de l'alliage HEA CC 4	193
4.43	Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CFC 1	193
4.44	Diffractionogramme de l'alliage HEA CFC 1	194
4.45	Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CFC 2	195
4.46	Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CFC 2	195
4.47	Diffractionogramme de l'alliage HEA CFC 2	196
4.48	Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CFC 3	197
4.49	Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CFC 3	197
4.50	Diffractionogramme de l'alliage HEA CFC 3	198
4.51	Positionnement des HEA conçus sur un diagramme d'Ashby	200

Listes des tableaux

1.1	Classification synthétique des méthodes de conception d'alliages informatiques.	8
2.1	Éléments inclus dans les bases de données thermodynamiques TCNI7 et TTNI8.	23
3.1	Solubilités approximatives de divers éléments dans le nickel à 1000 °C	66
3.2	Rôles des éléments (superalliages à base de nickel)	67
3.3	Variables des bases de données (modèles R_m et R_e)	80
3.4	Erreurs d'essai et d'apprentissage (modèle R_m)	83
3.5	Erreurs d'essai et d'apprentissage (modèle R_e)	85
3.6	Variables de la base de données (modèle CRF)	87
3.7	Erreurs d'essai et d'apprentissage (modèle CRF)	90
3.8	Variables de la base de données (modèle a_γ)	92
3.9	Erreurs d'essai et d'apprentissage (modèle a_γ)	94
3.10	Variables de la base de données (modèle $a_{\gamma'}$)	95
3.11	Erreurs d'essai et d'apprentissage (modèle $a_{\gamma'}$)	97
3.12	Espace de recherche (cas illustratif)	103
3.13	Espace de recherche (cas AD730)	110
3.14	Alliages sélectionnés pour fabrication	115
3.15	Écarts à la composition nominale des superalliages fabriqués	116
3.16	Microdureté des superalliages fabriqués	116
3.17	Espace de recherche (cas réaliste)	118
3.18	Composition et caractéristiques de l'ALT 740H	127
3.19	Constitution à l'équilibre à 750 °C de l'ALT 740H	127
3.20	Propriétés prédites de l'ALT 740H et comparaison avec les alliages commerciaux	128
3.21	Composition et caractéristiques de l'ALT 263	128
3.22	Constitution à l'équilibre à 750 °C de l'ALT 263	129
3.23	Propriétés nominales prédites de l'ALT 263 et comparaison avec l'alliage 263	129
3.24	Composition et caractéristiques de l'Inconel 740H et des alliages sélectionnés	134
3.25	Seuils d'indifférence et de préférence stricte servant au calcul des préférences.	135
3.26	Constitution à l'équilibre à 750 °C des alliages ALT	135
3.27	Classement des alliages ALT et de l'Inconel 740H selon PROMETHEE	136
4.1	Illustration de la routine de réparation des HEA	164
4.2	Les dix premières familles de HEA optimaux (1 ^{er} cas HEA)	171
4.3	Caractéristiques des alliages sélectionnés	177
4.4	Composition des alliages sélectionnés	177
4.5	Les dix premières familles de HEA optimaux (2 ^e cas HEA)	180
4.6	Composition et caractéristiques des alliages CFC sélectionnés	187
4.7	Résumé des résultats expérimentaux préliminaires sur les HEA	199

4.8	Valeurs des critères de conception des HEA fabriqués	199
A.1	Composition des alliages des bases de données R_m , R_e et CRF	214

Liste des critères de conception

3.2.1	Considérations générales (thermodynamique prédictive)	65
3.2.2	Renforcement par solution solide de la phase γ	67
3.2.3	Précipitation de la phase γ'	68
3.2.4	Désaccord paramétrique entre les phases γ et γ'	68
3.2.5	Maîtrise du solvus γ'	68
3.2.6	Exclusion de la phase η	69
3.2.7	Exclusion des phases γ'' et δ	69
3.2.8	Précipitation de carbures $M_{23}C_6$	70
3.2.9	Exclusion des phases TCP	70
3.2.10	Critère NEW PHACOMP $M_{d, crit}$	71
3.2.11	Résistance à la fissuration de solidification : critère BTR	74
3.2.12	Résistance à la fissuration de liquation	74
3.2.13	Résistance à la fissuration au réchauffage : quota γ'	75
3.2.14	Forgeabilité des superalliages	75
3.2.15	Résistance contre la corrosion : chrome « libre » $(Cr)_\gamma$	77
3.3.1	Considérations générales (fouille de données)	77
4.2.1	Critère de conception de HEA : le critère P_{IF}	159
4.2.2	Autres critères de conception de HEA : masse volumique (ρ) et résistance (CSSR)	160
4.5.1	Contrainte sur la structure cristalline des HEA	178

Préambule

Ce travail s'inscrit dans la continuation des efforts engagés depuis quelques années dans le domaine de la conception de matériaux métalliques assistée par ordinateur, associant des méthodes automatiques d'exploration des domaines de compositions possibles avec des outils prédictifs des caractéristiques des alliages. Sans se vouloir exhaustif sur la littérature scientifique associée — elle sera exposée ultérieurement —, le chapitre introductif suivant vise dans un premier temps à replacer le travail dans le cadre plus global de la métallurgie combinatoire, à la fois expérimentale et théorique, puis à retracer brièvement les précédents développements en matière de conception d'alliages assistée par ordinateur, pour enfin présenter la problématique de la thèse et la démarche choisie.

Introduction

1

La conception d'alliages est une activité ancestrale initiée dès le troisième millénaire avant notre ère par la découverte du bronze. Combinaison de cuivre et d'étain, le bronze possède des caractéristiques surpassant celles de ses constituants respectifs. Un phénomène de renforcement similaire est ensuite constaté avec le fer qui, enrichi en carbone, forme la base des fontes puis des aciers. L'attrait des alliages réside en cette capacité d'altérer les propriétés de métaux purs en y mêlant dans des proportions variables divers autres éléments. Au-delà des immédiats usages esthétiques, les alliages ont été essentiels à l'essor des activités monétaires, agricoles et militaires, et ont conditionné nombre d'avancées techniques : ainsi l'acier, indispensable à l'industrie ferroviaire émergente, est devenu à la fois un des objets et un des moteurs de la révolution industrielle du XIX^e siècle.

De l'âge de fer jusqu'à la fin du XIX^e siècle, la conception et la production d'alliages reposent largement sur l'empirisme. L'élaboration de l'acier, par exemple, consista pendant plusieurs siècles en la recherche d'un équilibre entre fer forgé doux et fonte dure, c'est-à-dire d'un compromis entre appauvrissement et enrichissement du fer en carbone. La source de carbone varie à travers les âges selon les carburants employés (charbon de bois puis charbon minéral) d'où provient une teneur variable en soufre. D'autres éléments d'alliages non négligeables, tel le phosphore, sont issus directement du minerai, conférant une dépendance géographique à certaines propriétés. De la même façon, la conception de laiton a longtemps consisté en l'ajout de zinc en proportions variables, estimées selon l'application : sculptures, pièces de monnaie, etc.

La composition des alliages métalliques s'est grandement complexifiée au cours du XX^e siècle, conduisant à la création de très nombreux alliages à la technicité jusqu'alors inégalée tels les alliages fer-chrome (aciers inoxydables), aluminium-cuivre, cobalt-tungstène et nickel-chrome. Possédant d'excellentes propriétés mécaniques ou chimiques, ces alliages déverrouillent des applications dans des domaines avides de matériaux performants telles les industries aéronautique, énergétique et chimique. Ainsi, les alliages légers aluminium-cuivre sont exploités pour la construction des premiers fuselages monocoques d'avions de chasse, tandis que les aciers inoxydables sont rapidement employés dans les turbosoverchargeurs de leurs moteurs, avant que la découverte d'alliages nickel-chrome-aluminium-titane, plus résistants à haute température, ne conduise à leur remplacement dans les années 1930.

À l'issue des années 1930, la nécessité de matériaux plus performants à haute température, en matière de résistance mécanique ou chimique, apparaît évidente. L'amélioration des performances des turbines à gaz de combustion (ou turboréacteurs) et des turbines à vapeur destinées à la production d'électricité, requiert en effet l'augmentation de leurs températures et pressions de fonctionnement. Ces nouveaux paramètres impliquent des conditions de service particulièrement sévères, au point que les aciers ne sont plus adaptés : les matériaux sont soumis à des sollicitations mécaniques cycliques de courtes et longues fréquences et à des environnements corrosifs,

le tout à des températures de plusieurs centaines de degrés Celsius. Pour faire face à ces nouvelles contraintes, la composition des alliages candidats s'est grandement complexifiée dans la deuxième moitié du xx^e siècle. Par exemple, les alliages nickel-chrome-aluminium-titane deviennent la base des « superalliages » qui, enrichis en cobalt, en fer ainsi qu'en éléments plus lourds tels le niobium, le molybdène, le tantale et le tungstène, offrent des propriétés largement supérieures à la précédente génération d'alliages.

La découverte et l'exploration de nouveaux systèmes d'alliages ont en outre motivé le développement de théories visant à fournir une compréhension physique des phénomènes de renforcement observés expérimentalement. L'émergence de la métallurgie physique à partir des années 1930 et son essor dans les décennies suivantes ont conduit à la théorisation de nombre de ces phénomènes : entre autres, d'importants travaux ont été menés sur les phénomènes diffusionnels, la formation et l'évolution des microstructures et de leurs défauts, les diagrammes et transformations de phases ainsi que sur la plasticité et l'endommagement des métaux. Ces travaux ont fait grandement avancer les connaissances sur les mécanismes intrinsèques conférant aux alliages leur résistance et ont amélioré progressivement la maîtrise de la conception d'alliages complexes. Malgré tout, la méthode principale pour le développement de nouveaux alliages a longtemps été et demeure encore en partie l'approche expérimentale ou approche essai-erreur. Celle-ci consiste en l'établissement de plans d'expériences permettant d'explorer expérimentalement une gamme de composition *a priori* intéressante selon les théories sus-citées, dans l'espoir de découvrir des alliages avec les propriétés désirées. Cette approche a plusieurs inconvénients la rendant longue et coûteuse : (a) elle nécessite la fabrication et la vérification d'autant de matériaux que nécessaires pour affiner leur composition et (b) elle requiert des règles quant à l'établissement des plans d'expériences.

La recherche d'alternatives à la méthode essai-erreur est une tâche attractive de par les possibles réductions des temps et des coûts de développement de nouveaux alliages. Il ne s'agit cependant pas d'une tâche simple car elle demande l'établissement de nombreux modèles physiques afin de remplacer les expérimentations, dont :

- (i) des modèles décrivant des propriétés d'usage tels le renforcement par solution solide ou par précipitation, les phénomènes diffusionnels, le comportement en fluage, l'endommagement, etc.;
- (ii) des modèles concernant la genèse et l'évolution des microstructures impliquant notamment, par exemple, la connaissance des solutions solides, des diagrammes de phases et des phénomènes de transformations de phases.

Entre autres, l'approche thermodynamique prédictive de type CALPHAD (*CAL*cul des *PH*ase *DI*agrams, calcul des diagrammes de phases), développée à partir des années 1970,¹ permet depuis quelques décennies la détermination fiable de la constitution d'équilibre d'un alliage² par extrapolation de données thermodynamiques contenues dans des bases dédiées aux alliages les plus courants : fer, aluminium, nickel, titane... Les résultats de la thermodynamique prédictive peuvent alimenter les modèles mentionnés précédemment, en fournissant pour les modèles de type (i) les proportions et compositions des phases (solutions solides, précipités) et pour les modèles de type (ii) une indication de la structure d'équilibre vers laquelle les transformations doivent tendre.

Parce qu'ils permettent d'anticiper de façon fiable certaines caractéristiques d'alliages, ces outils peuvent contribuer à réduire le nombre d'expérimentations superflues en restreignant *a priori* les plans d'expériences. Cependant, l'abondance des mécanismes physiques au sein d'un alliage signifie qu'une « théorie du tout » métallurgique n'existe pas encore de nos jours : par exemple, il est encore impossible de prédire les propriétés macroscopiques d'un alliage à l'aide d'un modèle purement théorique, c'est-à-dire d'une description mathématique formalisant tous les phénomènes physiques impliqués et leurs interactions. À défaut d'un modèle prédictif complet, des techniques

de fouille de données peuvent être exploitées afin de prédire certaines propriétés par régression à partir de mesures expérimentales effectuées sur de nombreux alliages réels. Dans cette optique, l'emploi de réseaux de neurones artificiels^{3,4} et de processus gaussiens⁵ a notamment été reporté.

À partir des modèles décrits précédemment, il devient possible de décrire les relations entre les différentes caractéristiques hiérarchiques d'un alliage : sa composition, son procédé de fabrication, sa structure à l'échelle microscopique (ou microstructure), ses propriétés (mécaniques, chimiques, etc.) et donc ses performances en conditions d'usage. Appuyées par des moyens informatiques de plus en plus performants, les méthodes prédictives développées au cours des vingt dernières années contribuent à la résolution d'un des problèmes posés par l'approche essai-erreur, en permettant de se passer de la fabrication et de la caractérisation systématique d'un grand nombre d'alliages. De par le nombre de modèles exploités et leur degré d'intégration, les approches *Integrated Computational Materials Engineering* (ICME^{6,7}) et *Alloys-By-Design*⁸ font partie des initiatives les plus notables dans le domaine de la conception d'alliages assistée par ordinateur. Celles-ci proposent la combinaison de plusieurs modèles à différentes échelles (de nano- à macroscopique) pour estimer plusieurs propriétés physiques, mécaniques et chimiques. Le recours à ces approches a déjà fait ses preuves dans le domaine de la conception d'alliages performants, comme l'illustrent notamment les nombreuses applications de l'approche ICME,⁹ et plus généralement de la fouille de données et de la thermodynamique prédictive.^{10–26}

Néanmoins, bien qu'indispensables à l'accélération du développement de nouveaux alliages, les approches analytiques n'en constituent pour autant qu'une partie. Grâce à celles-ci, il est possible d'anticiper les performances d'un alliage et de limiter les erreurs, ces dernières étant coûteuses lorsqu'il s'agit de fabriquer et de tester des matériaux. Pourtant, si elles sont employées seules, un problème demeure : celui de l'établissement d'un plan d'expériences visant à explorer un domaine de compositions *a priori* pertinent pour l'obtention des propriétés désirées.

De tels domaines de composition sont relativement aisément isolés par l'expérience dans le cas d'alliages simples (binaires, ternaires et quaternaires) parce qu'ils sont de taille raisonnable de par le nombre d'éléments concernés. À l'inverse, dans le cas d'alliages complexes (quinaires et au-delà), cette tâche est ardue : non seulement les interactions entre constituants sont nombreuses mais l'abondance d'éléments implique un nombre d'alliages productibles gigantesque. Par exemple, dans le cas des superalliages à base de nickel, la possibilité d'allier en proportions plus ou moins grandes le nickel avec une douzaine d'éléments suppose l'existence de plusieurs milliards de combinaisons différentes d'additions. En effet, si un système d'alliages comporte douze éléments qui peuvent chacun prendre 50 valeurs (de 0 à 5 %_{mass.} par pas de 0,1 %_{mass.} par exemple), le nombre d'alliages productibles est $50^{12} \approx 2,4 \times 10^{20}$! La recherche d'alliages performants constitue donc un problème d'optimisation combinatoire. Ainsi, la stratégie typique consistant à itérer successivement sur la teneur en différentes additions devient caduque : les temps de vérification, expérimentale ou analytique, deviennent prohibitifs : effectuer $2,4 \times 10^{20}$ calculs de thermodynamique prédictive en série prendrait en effet plus de 155 milliards d'années à raison d'environ quatre millions de calculs par jour (ordre de grandeur constaté sur un micro-ordinateur moderne).

Ce constat a motivé le développement de méthodes couplant les modèles analytiques avec des algorithmes d'optimisation telles les métaheuristiques. Le principe de cette combinaison repose sur l'exploitation automatique des informations encodées dans les modèles par ces algorithmes de recherche. Les métaheuristiques sont particulièrement adaptées à l'exploration des grands espaces de compositions caractéristiques des alliages complexes. À la place du quadrillage systématique de l'espace opéré par un plan d'expériences naïf, ces méthodes réalisent une exploration stochastique de l'espace des possibles, couplée à une approche itérative où les alliages sont sélectionnés en fonction des performances des matériaux précédemment évalués. Ce balayage « intelligent »

de l'espace des compositions résulte en une réduction considérable des temps de calcul — souvent au prix d'une solution sous-optimale comparée aux résultats de la recherche exhaustive. Ces algorithmes permettent ainsi l'optimisation de la chimie des alliages : en effet, les alliages sélectionnés pour évaluation constituent souvent une amélioration par rapport à leurs prédécesseurs. Cette sélection préférentielle répétée conduit à la bonification des propriétés des matériaux *via* l'affinage progressif de leur composition.

Les différentes approches proposant l'interfaçage de modèles prédictifs et de métaheuristiques pour la conception d'alliages diffèrent notamment par le nombre d'outils intégrés. Un algorithme génétique est employé par Mahfouf²⁷ pour optimiser la composition et le traitement thermique d'aciers afin de maximiser leurs propriétés mécaniques, prédites par plusieurs réseaux de neurones artificiels. Xu *et al.*²⁸ couplent un algorithme génétique avec la méthode CALPHAD pour optimiser le renforcement par précipitation dans des aciers inoxydables tout en évitant la formation de phases délétères. Dans le travail de Das *et al.*,²⁹ des réseaux de neurones artificiels reliant compositions et paramètres de laminage avec les propriétés mécaniques d'aciers à haute résistance sont combinés avec un algorithme génétique dans l'optique d'optimiser leur composition et d'obtenir un bon compromis entre résistance et ductilité. Le couplage d'un algorithme génétique avec une technique de fouille de données et la thermodynamique prédictive a été réalisé par Tancret³⁰ et Conduit *et al.*³¹ pour la conception de superalliages à base de nickel résistants au fluage et peu onéreux. Dans tous les cas, une revue bibliographique montre dans ce contexte la prépondérance des algorithmes génétiques en tant qu'outils d'exploration et d'optimisation.

Nombre de ces travaux fait usage d'une métaheuristique mono-objectif, c'est-à-dire que l'optimisation est conduite sur une seule quantité (une propriété physique ou mécanique, une grandeur thermodynamique, etc.) ou sur une combinaison algébrique de grandeurs, par exemple le ratio d'une propriété sur le coût. Le résultat de telles optimisations ne peut être qu'unique car la comparaison de deux alliages selon un seul critère conduit irrémédiablement à la conservation d'un seul candidat, meilleur que tous les autres selon l'unique critère choisi : le moins cher ou le plus résistant par exemple, ou celui présentant le meilleur rapport entre résistance et coût. Cette singularité n'est pas représentative de la complexité des problèmes réels dont la résolution impose souvent l'adoption de compromis.

À l'opposé du principe de l'optimisation mono-objectif se trouve le paradigme multiobjectifs. Celui-ci permet la prise en compte simultanée de plusieurs critères lors de la recherche d'alliages, tels le coût et la résistance. En conséquence, les résultats d'une telle recherche ne consistent pas en un candidat unique mais en un ensemble de compromis caractérisés, par exemple, par des prix et des résistances variés.

La [figure 1.1](#) illustre ce principe. L'alliage A possède une excellente résistance au détriment d'un prix élevé tandis que l'alliage B présente une résistance modérée mais est meilleur marché. Dans le cadre d'une optimisation mono-objectif, ces deux alliages pourraient être comparés selon le ratio de leur résistance sur leur coût, le meilleur étant celui possédant le ratio le plus élevé. À l'inverse, dans le cadre d'une optimisation multiobjectifs, ces deux alliages sont incomparables : ils représentent deux compromis optimaux. En effet, il ne peut exister d'alliage moins cher et aussi résistant, ni d'alliage aussi cher et plus résistant. Les alliages A et B, comme tous ceux situés sur la courbe en gras, sont dits Pareto-optimaux. Les alliages en deçà de cette courbe sont dits dominés : c'est le cas de l'alliage C. Celui-ci est aussi cher que l'alliage A mais est moins résistant ; il n'est donc comparativement pas attractif.

Le paradigme multiobjectifs a plusieurs avantages. Il permet l'obtention d'un ensemble de compromis susceptibles d'être considérés par le décideur là où la philosophie mono-objectif impose le choix du seul matériau qui en est issu, souvent au prix d'une réduction artificielle du nombre

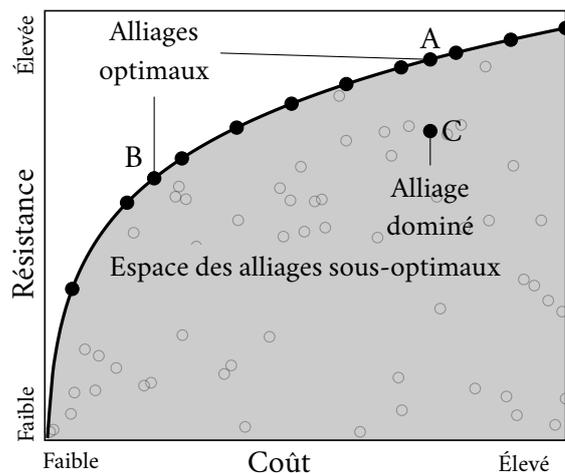


Figure 1.1 — Illustration du principe de la Pareto-optimalité. Les alliages A et B sont optimaux au sens de Pareto et représentent deux alternatives pertinentes. L'alliage C est sous-optimal par rapport à A et est dit dominé.

d'objectifs qui prive le décideur d'options potentiellement pertinentes. Le paradigme multiobjectifs offre également la possibilité de discriminer entre alliages optimaux et sous-optimaux, c'est-à-dire entre alliages qu'il est légitime de considérer et ceux qui ne présentent pas d'avantage sur les premiers et dont la pertinence est limitée. Cette discrimination est, avec l'établissement d'un ensemble d'alternatives optimales, avantageuse pour le décideur car la sélection d'un matériau peut alors être opérée en toute connaissance des concessions faites.

Néanmoins, malgré le recours à des algorithmes d'optimisation combinatoire évitant l'établissement de plans d'expériences gigantesques, l'exploration d'un espace de plusieurs milliards de possibilités ($2,4 \times 10^{20}$ alliages pour reprendre l'exemple précédent) demeure contraignante. En effet, un échantillonnage suffisant de l'espace, c'est-à-dire l'évaluation prédictive de quelques centaines de milliers voire quelques millions d'alliages, peut être nécessaire afin de garantir l'optimalité des compositions découvertes. Ainsi, pour qu'une optimisation puisse être conduite dans des temps raisonnables (quelques mois au plus), il est nécessaire que chaque évaluation prédictive ne requière que quelques secondes de calculs. Cet impératif exclut *de facto* un certain nombre de méthodes analytiques dont, notamment, les calculs de champ de phase, de dynamique moléculaire (MD) et de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), ainsi que les simulations par éléments finis de propriétés thermomécaniques et microstructurelles, et tout autre modèle (de diffusion, de précipitation) complexe et gourmand en temps de calcul. En revanche, les techniques semi-empiriques basées sur la fouille de données peuvent fournir rapidement des prédictions fiables en opérant par régression sur des mesures expérimentales. Ces techniques incluent notamment les réseaux de neurones artificiels, les processus gaussiens et la méthode CALPHAD de thermodynamique prédictive.

Le [tableau 1.1](#) résume différentes approches d'optimisation empruntées pour la conception informatisée d'alliages divers : aciers fortement alliés, superalliages à base de nickel, alliages d'aluminium renforcés par précipitation, etc. Les approches sont discriminées selon qu'elles intègrent la thermodynamique prédictive, des modèles de régression créés à partir de données expérimentales et une métaheuristique mono- ou multiobjectifs.

TABLEAU 1.1 — Classification synthétique des méthodes de conception d’alliages informatiques. L’approche de Rettig *et al.*³² fait usage de modèles de substitution, par régression, à la place de la thermodynamique prédictive,³³ d’où les parenthèses.

Référence	Métaheuristique		Modèles créés à partir de données	Thermodynamique prédictive
	Mono-objectif	Multiobjectifs		
Mahfouf ²⁷ Das <i>et al.</i> ²⁹ Sun <i>et al.</i> ³⁴ Reddy <i>et al.</i> ³⁵	✓	—	✓	—
Xu <i>et al.</i> ²⁸ Rivera-Díaz-del-Castillo & Xu ³⁶ Tancret ³⁷ Lu <i>et al.</i> ³⁸	✓	—	—	✓
Tancret ³⁰ Conduit <i>et al.</i> ³¹	✓	—	✓	✓
Mahfouf <i>et al.</i> ³⁹ Egorov-Yegorov & Dulikravich ⁴⁰ Zhang & Mahfouf ⁴¹ Bhargava <i>et al.</i> ⁴² Kumar <i>et al.</i> ⁴³ Jha <i>et al.</i> ⁴⁴ Pattanayak <i>et al.</i> ⁴⁵ Dey <i>et al.</i> ⁴⁶	—	✓	✓	—
Rettig <i>et al.</i> ³²	—	✓	—	(✓)
Approche proposée	—	✓	✓	✓

Ainsi, ce travail de thèse part d’un constat actuel : celui de l’absence de système exploitant les approches analytiques évoquées précédemment dans le cadre d’une optimisation multiobjectifs (cf. [tableau 1.1](#)). L’objectif de cette étude est donc l’intégration d’une méthode de thermodynamique prédictive et de modèles basés sur la fouille de données au sein d’un algorithme d’optimisation combinatoire multiobjectifs. Le recours à une métaheuristique simplifie la recherche de compositions optimales d’alliages complexes dans des espaces combinatoires gigantesques. Cette recherche est guidée d’une part par la thermodynamique prédictive, qui permet la prédiction de plusieurs caractéristiques thermochimiques des alliages, et d’autre part par des modèles fournissant une estimation de certaines de leurs propriétés thermomécaniques et thermophysiques par régression, le tout seulement à partir de la composition des alliages. Dans le cadre de cette étude, l’accent est mis sur l’optimisation de la composition et de la microstructure (en particulier de la constitution) d’alliages en vue de l’obtention de propriétés optimales ; les procédés de fabrication et les traitements thermiques seront considérés d’une manière implicite qui sera détaillée ultérieurement.

Dans cette optique d’intégration, cette étude fait usage des outils suivants :

1. pour la thermodynamique prédictive : l’approche CALPHAD, détaillée dans la [section 2.1](#) ;
2. pour la fouille de données et la régression non linéaire multivariées : les processus gaussiens, introduits dans la [section 2.2](#).

3. pour l'optimisation multiobjectifs : un algorithme génétique dont le fonctionnement est explicité dans la [section 2.3](#);

La bibliographie se rapportant à chaque méthode sera exposée dans les sections respectives. Le choix de ces outils y sera également justifié et leur exploitation détaillée.

Le système d'optimisation intégrée sera illustré par la conception de plusieurs nuances de deux familles d'alliages différentes : d'une part les superalliages à base de nickel et d'autre part les alliages dits « à forte entropie ». La chimie extrêmement complexe de ces deux familles d'alliages aux propriétés remarquables justifie pleinement le recours à la métaheuristique proposée.

Les superalliages à base de nickel sont indispensables aux industries aérospatiale et énergétique. Leur emploi dans les turbines à gaz (pour la propulsion d'aérodynes) ou à vapeur (pour la génération d'électricité) est crucial car il permet d'atteindre des températures de fonctionnement plus élevées qu'avec des aciers, améliorant le rendement global⁴⁷ ; de fait, la consommation de carburant est réduite et l'émission de gaz à effet de serre est limitée. Pour résister à des températures entre 600 et 1100 °C, leur composition est complexe : ils contiennent en effet au minimum six éléments d'addition qui contribuent, selon les cas, aux caractéristiques thermomécaniques ou thermo-chimiques de l'alliage. L'optimisation de la composition de trois types de superalliages à base de nickel polycristallins corroyés destinés à la fabrication de tuyauteries pour centrales thermiques et de disques de turbines pour la production d'électricité ou la propulsion aéronautique est présentée dans le [chapitre 3](#). Le cahier des charges d'une de ces illustrations a été établi en partenariat avec l'entreprise Aubert & Duval. Quelques résultats expérimentaux très préliminaires sont également exposés dans ce chapitre.

Parce que le cadre multiobjectifs conduit à un ensemble de solutions Pareto-optimales correspondant à une variété de compromis entre les caractéristiques optimisées des alliages, une autre difficulté apparaît. Lorsque le nombre de caractéristiques recherchées est supérieur à deux ou trois et si l'algorithme d'optimisation propose un nombre élevé d'alternatives (des centaines ou des milliers par exemple), le décideur peut en effet se heurter à un « problème de riches », à savoir le choix du meilleur alliage optimal satisfaisant son cahier des charges. Dans de tels cas, une formalisation de ce cahier des charges ou des préférences de l'utilisateur final *via* l'utilisation d'outils d'aide à la décision multicritères peut assister et faciliter ce choix. Cet aspect sera également illustré dans le [chapitre 3](#).

La deuxième illustration porte sur les alliages à forte entropie. Relativement récents,⁴⁸ ces alliages ont des propriétés très variées les rendant potentiellement adaptés à de nombreuses applications ; ils sont notamment considérés comme de possibles alternatives aux superalliages.^{49,50} Leur composition est originale comparée à celle des alliages standards : elle consiste en un mélange homogène (en solution solide) d'au moins cinq éléments en fortes concentrations. Les alliages équimolaires AlCoCrCuFeNi, CoCrFeMnNi et MoNbTaVW sont des exemples emblématiques de tels matériaux. Les proportions élevées de tous les éléments font qu'il n'existe plus à proprement parler d'élément de base. L'élaboration d'alliages à forte entropie est compliquée : (i) quelques trente éléments métalliques ou métalloïdes peuvent entrer dans leur composition et (ii) des teneurs entre 5 et 35 %_{at.} sont possibles pour chaque élément d'après une des définitions les plus larges.⁴⁸ L'espace des compositions est donc encore plus vaste que celui des superalliages à base de nickel. Le [chapitre 4](#) détaille la procédure employée pour résoudre le problème de l'exploration combinatoire d'un tel espace ainsi que les modèles physicochimiques et statistiques guidant cette recherche. Ce chapitre regroupe également quelques résultats préliminaires de la validation expérimentale portant sur des matériaux issus de la méthode de conception proposée.

Références

1. KAUFMAN, L. & BERNSTEIN, H. [Computer Calculation of Phase Diagrams: with Special Reference to Refractory Metals](#), Academic Press, New York (1970), ISBN : 978-0-12-402050-4, cf. pages 4, 18.
2. SAUNDERS, N., CAHN, R. W., MCLEAN, M., RAPPAZ, M. & PETTIFOR, D. G. [Phase diagram calculations for high-temperature structural materials](#), *Philosophical Transactions: Physical Sciences and Engineering* **351** (1697), 543–561 (1995), cf. pages 4, 71.
3. BHADESHIA, H. K. D. H., MACKEY, C. & SVENSSON, E. [Impact toughness of C-Mn steel arc welds: Bayesian neural network analysis](#), *Materials Science and Technology* **11** (10), 1046–1051 (1995), cf. pages 5, 28.
4. JONES, J. & MACKEY, D. J. C. [Neural network modelling of the mechanical properties of nickel base superalloys](#), *Superalloys 1996 (Eighth International Symposium)*, 417–424, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (1996), cf. pages 5, 28, 35.
5. BAILER-JONES, C. A. L., BHADESHIA, H. K. D. H. & MACKEY, D. J. C. [Gaussian process modelling of austenite formation in steel](#), *Materials Science and Technology* **15** (3), 287–294 (1999), cf. pages 5, 35.
6. OLSON, G. B. [Computational Design of Hierarchically Structured Materials](#), *Science* **277** (5330), 1237–1242 (1997), cf. page 5.
7. XIONG, W. & OLSON, G. B. [Integrated computational materials design for high-performance alloys](#), *Materials Research Society Bulletin* **40** (12), 1035–1044 (2015), cf. page 5.
8. RAE, C. M. F. [Alloys by Design: modelling next generation superalloys](#), *Materials Science and Technology* **25** (4), 479–487 (2009), cf. page 5.
9. QUESTEK INNOVATIONS LLC. Example Projects. En ligne : <http://www.questek.com/example-projects.html> (visité le 12/05/2016), cf. page 5.
10. BRUN, F., YOSHIDA, T., ROBSON, J. D., NARAYAN, V., BHADESHIA, H. K. D. H. & MACKEY, D. J. C. [Theoretical design of ferritic creep resistant steels using neural network, kinetic, and thermodynamic models](#), *Materials Science and Technology* **15** (5), 547–554 (1999), cf. pages 5, 21, 28.
11. SMALL, C. J. & SAUNDERS, N. [The Application of CALPHAD Techniques in the Development of a New Gas-Turbine Disk Alloy](#), *Materials Research Society Bulletin* **24** (4), 22–26 (1999), cf. pages 5, 21.
12. SAUNDERS, N., FAHRMANN, M. & SMALL, C. J. [The Application of CALPHAD Calculations to Ni-Based Superalloys](#), *Superalloys 2000 (Ninth International Symposium)*, 803–811, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2000), cf. pages 5, 21.
13. MALINOVA, T., PANTEV, N. & MALINOV, S. [Prediction of surface hardness after ferritic nitrocarburising of steels using artificial neural networks](#), *Materials Science and Technology* **17** (2), 168–174 (2001), cf. pages 5, 28, 29.
14. SCHAFFERNAK, B. C. & CERJAK, H. H. [Design of Improved Heat Resistant Materials by Use of Computational Thermodynamics](#), *Calphad* **25** (2), 241–251 (2001), cf. pages 5, 21.
15. TANCRET, F., BHADESHIA, H. K. D. H. & MACKEY, D. J. C. [Design of a creep resistant nickel base superalloy for power plant applications: Part 1 — Mechanical properties modelling](#), *Materials Science and Technology* **19** (3), 283–290 (2003), cf. pages 5, 21, 35, 77, 78, 103.

16. DE CARLAN, Y., MURUGANANTH, M., SOURMAIL, T. & BHADOSHIA, H. K. D. H. [Design of new Fe-9CrWV reduced-activation martensitic steels for creep properties at 650 °C](#), *Journal of Nuclear Materials* **329-333** (Part A), 238–242 (2004), cf. pages 5, 28.
17. YOO, Y. S., KIM, I. S., KIM, D. H., JO, C. Y., KIM, H. M. & JONES, C. N. [The Application of Neural Network to the Development of Single Crystal Superalloys](#), *Superalloys 2004 (Tenth International Symposium)*, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2004), cf. pages 5, 28.
18. KNEŽEVIĆ, V., BALUN, J., SAUTHOFF, G., INDEN, G. & SCHNEIDER, A. [Design of martensitic/ferritic heat-resistant steels for application at 650 °C with supporting thermodynamic modelling](#), *Materials Science and Engineering A* **477** (1-2), 334–343 (2008), cf. pages 5, 21.
19. REED, R. C., TAO, T. & WARNKEN, N. [Alloys-By-Design: Application to nickel-based single crystal superalloys](#), *Acta Materialia* **57** (19), 5898–5913 (2009), cf. pages 5, 99.
20. BHATTACHARYYA, T., SINGH, S. B., SIKDAR (DEY), S., BHATTACHARYYA, S., BLECK, W. & BHATTACHARJEE, D. [Microstructural prediction through artificial neural network \(ANN\) for development of transformation induced plasticity \(TRIP\) aided steel](#), *Materials Science and Engineering A* **565**, 148–157 (2013), cf. pages 5, 28.
21. CRUDDEN, D. J., RAEISINIA, B., WARNKEN, N. & REED, R. C. [Analysis of the chemistry of Ni-base turbine disk superalloys using an alloys-by-design modeling approach](#), *Metallurgical and Materials Transactions A* **44** (5), 2418–2430 (2013), cf. pages 5, 21, 28.
22. HUANG, H., SHERIF, M. Y. & RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. [Combinatorial optimization of carbide-free bainitic nanostructures](#), *Acta Materialia* **61** (5), 1639–1647 (2013), cf. pages 5, 21.
23. CRUDDEN, D. J., MOTTURA, A., WARNKEN, N., RAEISINIA, B. & REED, R. C. [Modelling of the influence of alloy composition on flow stress in high-strength nickel-based superalloys](#), *Acta Materialia* **75**, 356–370 (2014), cf. pages 5, 21.
24. GAO, M. C., CARNEY, C. S., DOĞAN, Ö. N., JABLONKSI, P. D., HAWK, J. A. & ALMAN, D. E. [Design of Refractory High-Entropy Alloys](#), *Journal of Materials* **67** (11), 2653–2669 (2015), cf. pages 5, 22.
25. GUO, J., LIAO, B., LIU, L., GAO, Y., REN, X. & YANG, Q. [Composition Optimization and Experimental Characterization of a Novel Steel Based on CALPHAD](#), *Journal of Materials Engineering and Performance* **24** (5), 2099–2107 (2015), cf. pages 5, 21.
26. ZHU, Z., HÖGLUND, L., LARSSON, H. & REED, R. C. [Isolation of optimal compositions of single crystal superalloys by mapping of a material's genome](#), *Acta Materialia* **90**, 330–343 (2015), cf. page 5.
27. MAHFOUF, M. [Optimal Design of Alloy Steels Using Genetic Algorithms](#). *Advances in Computational Intelligence and Learning: Methods and Applications* 425–436, Springer Netherlands, Dordrecht (2002), cf. pages 6, 8, 41.
28. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & van der ZWAAG, S. [Designing nanoprecipitation strengthened UHS stainless steels combining genetic algorithms and thermodynamics](#), *Computational Materials Science* **44** (2), 678–689 (2008), cf. pages 6, 8, 21, 42.
29. DAS, P., MUKHERJEE, S., GANGULY, S., BHATTACHARYAY, B. K. & DATTA, S. [Genetic algorithm based optimization for multi-physical properties of HSLA steel through hybridization of neural network and desirability function](#), *Computational Materials Science* **45** (1), 104–110 (2009), cf. pages 6, 8, 42.

30. TANCRET, F. Computational thermodynamics, Gaussian processes and genetic algorithms: combined tools to design new alloys, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **21** (4) N°045013 (2013), cf. pages 6, 8, 21, 35, 42.
31. CONDUIT, B. D., JONES, N. G., STONE, H. J. & CONDUIT, G. J. Concurrent materials design En ligne : <http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/~gjc29/Papers/ConduitJonesStoneConduit14.pdf> (visité le 15/07/2016) (2014), cf. pages 6, 8, 28, 44.
32. RETTIG, R., RITTER, N. C., HELMER, H. E., NEUMEIER, S. & SINGER, R. F. Single-crystal nickel-based superalloys developed by numerical multi-criteria optimization techniques: design based on thermodynamic calculations and experimental validation, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **23** (3) N°035004 (2015), cf. pages 8, 44.
33. RETTIG, R. & SINGER, R. F. Fast interpolation algorithm for the calculation of thermodynamic property maps of microstructures, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **22** (8) N°085002 (2014), cf. page 8.
34. SUN, Y., ZENG, W. D., HAN, Y. F., MA, X. & ZHAO, Y. Q. Optimization of chemical composition for TC11 titanium alloy based on artificial neural network and genetic algorithm, *Computational Materials Science* **50** (3), 1064–1069 (2011), cf. pages 8, 28, 42.
35. REDDY, N. S., KRISHNAIAH, J., YOUNG, H. B. & LEE, J. S. Design of medium carbon steels by computational intelligence techniques, *Computational Materials Science* **101**, 120–126 (2015), cf. pages 8, 42.
36. RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & XU, W. Heat Treatment and Composition Optimization of Nanoprecipitation Hardened Alloys, *Materials and Manufacturing Processes* **26** (3), 375–381 (2011), cf. pages 8, 21, 42.
37. TANCRET, F. Computational thermodynamics and genetic algorithms to design affordable γ' -strengthened nickel–iron based superalloys, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **20** (4) N°045012 (2012), cf. pages 8, 21, 35, 42, 209.
38. LU, Q., van der ZWAAG, S. & XU, W. High-throughput design of low-activation, high-strength creep-resistant steels for nuclear-reactor applications, *Journal of Nuclear Materials* **469**, 217–222 (2016), cf. pages 8, 21, 42.
39. MAHFOUF, M., JAMEI, M. & LINKENS, D. A. Optimal Design of Alloy Steels Using Multiobjective Genetic Algorithms, *Materials and Manufacturing Processes* **20** (3), 553–567 (2005), cf. pages 8, 27, 43.
40. EGOROV-YEGOROV, I. N. & DULIKRAVICH, G. S. Chemical Composition Design of Super-alloys for Maximum Stress, Temperature, and Time-to-Rupture Using Self-Adapting Response Surface Optimization, *Materials and Manufacturing Processes* **20** (3), 569–590 (2005), cf. pages 8, 30, 38, 44.
41. ZHANG, Q. & MAHFOUF, M. A nature-inspired multi-objective optimisation strategy based on a new reduced space searching algorithm for the design of alloy steels, *Engineering Applications of Artificial Intelligence* **23** (5), 660–675 (2010), cf. pages 8, 43.
42. BHARGAVA, S., DULIKRAVICH, G. S., MURTY, G. S., AGARWAL, A. & COLAÇO, M. J. Stress Corrosion Cracking Resistant Aluminum Alloys: Optimizing Concentrations of Alloying Elements and Tempering, *Materials and Manufacturing Processes* **26** (3), 363–374 (2011), cf. pages 8, 44.
43. KUMAR, A., CHAKRABARTI, D. & CHAKRABORTI, N. Data-Driven Pareto Optimization for Microalloyed Steels Using Genetic Algorithms, *Steel Research International* **83** (2), 169–174 (2012), cf. pages 8, 28, 43.

44. JHA, R., PETTERSSON, F., DULIKRAVICH, G. S., SAXEN, H. & CHAKRABORTI, N. [Evolutionary Design of Nickel-Based Superalloys Using Data-Driven Genetic Algorithms and Related Strategies](#), *Materials and Manufacturing Processes* **30** (4), 488–510 (2015), cf. pages 8, 28, 30, 31, 43.
45. PATTANAYAK, S., DEY, S., CHATTERJEE, S., CHOWDHURY, S. G. & DATTA, S. [Computational intelligence based designing of microalloyed pipeline steel](#), *Computational Materials Science* **104**, 60–68 (2015), cf. pages 8, 28, 43.
46. DEY, S., GANGULY, S. & DATTA, S. [In silico Design of High Strength Aluminium Alloy Using Multi-objective GA. Swarm, Evolutionary, and Memetic Computing: 5th International Conference \(SEMCCO 2014\)](#) 316–327, Springer International Publishing (2015), cf. pages 8, 28, 43.
47. SIMÕES-MOREIRA, J. R. [Fundamentals of thermodynamics applied to thermal power plants](#). *Springer Series in Reliability Engineering* 7–39, Springer-Verlag, London (2012), ISBN : 978-1-4471-2308-8, cf. page 9.
48. YEH, J. W., CHEN, S. K., LIN, S. J., GAN, J. Y., CHIN, T. S., SHUN, T. T., TSAU, C. H. & CHANG, S. Y. [Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes](#), *Advanced Engineering Materials* **6** (5), 299–303 (2004), cf. pages 9, 147, 148, 154, 160.
49. TSAI, M.-H. & YEH, J.-W. [High-Entropy Alloys: A Critical Review](#), *Materials Research Letters* **2** (3), 107–123 (2014), cf. pages 9, 148.
50. MIRACLE, D. B., MILLER, J. D., SENKOV, O. N., WOODWARD, C., UCHIC, M. D. & TILLEY, J. [Exploration and development of high entropy alloys for structural applications](#), *Entropy* **16** (1), 494–525 (2014), cf. pages 9, 22, 157.

Outils de conception d'alliages 2

Dans ce chapitre, les outils de la méthode de conception d'alliages proposée sont détaillés. Une revue des principes de la thermodynamique prédictive, de la fouille de données et des algorithmes génétiques, ainsi que de leur usage pour la conception d'alliages métalliques, est ainsi exposée dans les sections 2.1, 2.2 et 2.3 respectivement. Des synthèses partielles à l'issue de chacune de ces parties résument les points essentiels.

Sommaire

2.1	Thermodynamique prédictive	16
2.1.1	L'approche CALPHAD	18
2.1.2	CALPHAD pour la conception d'alliages	20
2.1.3	Bases de données thermodynamiques	22
2.1.4	Synthèse	23
2.2	Fouille de données pour la prédiction de caractéristiques d'alliages	24
2.2.1	Réseaux de neurones artificiels	25
2.2.2	Programmation génétique	29
2.2.3	Régression par machine à vecteurs de support	31
2.2.4	Processus gaussiens	32
2.2.5	Synthèse	36
2.3	Algorithmes génétiques et analyse décisionnelle	38
2.3.1	Algorithmes génétiques : généralités	39
2.3.2	Les algorithmes génétiques pour la conception d'alliages	41
2.3.3	L'algorithme génétique de tri de non-domination	44
2.3.4	Aide à la décision multicritères	48
2.3.5	Synthèse	51
	Références	51

2.1 Thermodynamique prédictive pour l'estimation de caractéristiques thermochimiques

Les alliages métalliques sont le plus souvent des matériaux cristallins : leurs atomes sont organisés de manière systématique sur des dimensions vastes comparées à leur taille, possiblement jusqu'à l'échelle macroscopique. Cette organisation provient de l'adoption de quelques structures cristallines par la plupart des métaux de transition du tableau périodique, les principales étant les structures cubique centrée, cubique à faces centrées et hexagonale compacte, illustrées sur la [figure 2.1](#).

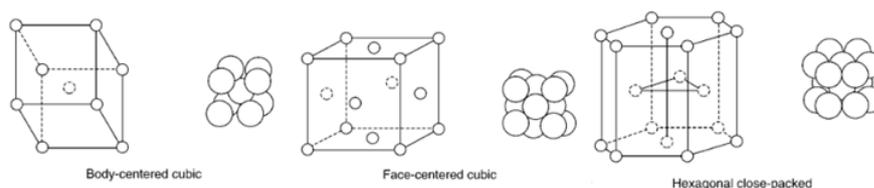


Figure 2.1 — Différentes structures cristallines décrivant l'arrangement des atomes dans une phase.⁵¹ De gauche à droite : la structure cubique centrée (un atome à chaque sommet du cube, un au centre); la structure cubique à faces centrées (un atome à chaque sommet du cube, un au centre de chaque face); la structure hexagonale compacte.

Généralement, le mélange de plusieurs métaux résulte également en un ensemble cristallin. L'accommodation d'atomes d'espèces différentes conduit à la formation de phases de deux natures : les solutions solides et les composés définis (ou « intermétalliques »). Une représentation schématique de ces arrangements dans le cas d'un alliage binaire est donnée en [figure 2.2](#).

Une solution solide consiste en une répartition aléatoire et dans des proportions variables des différents types d'atomes dans une même structure cristalline. Deux types de solutions solides existent ([figure 2.2](#)) :

- les solutions solides de substitution : les atomes du soluté (représentés en bleu sur la [figure 2.2](#)) se substituent de manière non ordonnée aux atomes du solvant (en rouge) sur les sites atomiques de la structure ;
- les solutions solides d'insertion : les atomes du soluté s'insèrent de manière non ordonnée entre les atomes du solvant sur les sites interstitiels de la structure.

À l'opposé des solutions solides, les composés définis sont caractérisés par un arrangement des atomes non aléatoire, tel que représenté à droite sur la [figure 2.2](#), ainsi qu'une stœchiométrie généralement fixe. Dans le cas où l'un et/ou l'autre sous-réseau admet partiellement l'autre élément en solution solide, on parle plutôt de « phase intermédiaire ».

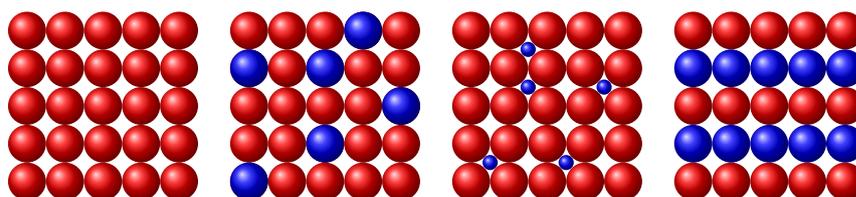


Figure 2.2 — Arrangements possibles d'atomes de deux espèces différentes. De gauche à droite : arrangement des atomes d'un métal pur ; solution solide de substitution ; solution solide d'insertion (ou interstitielle) ; composé défini.

Un alliage peut être constitué de plusieurs solutions solides ou composés intermétalliques selon que l'arrangement global des différents types d'atomes soit favorable ou défavorable à leur stabilité. L'organisation de ces phases entre elles, caractérisée par leur nombre, leur nature, leur proportion et leur géométrie, représente la microstructure d'un alliage (figure 2.3).

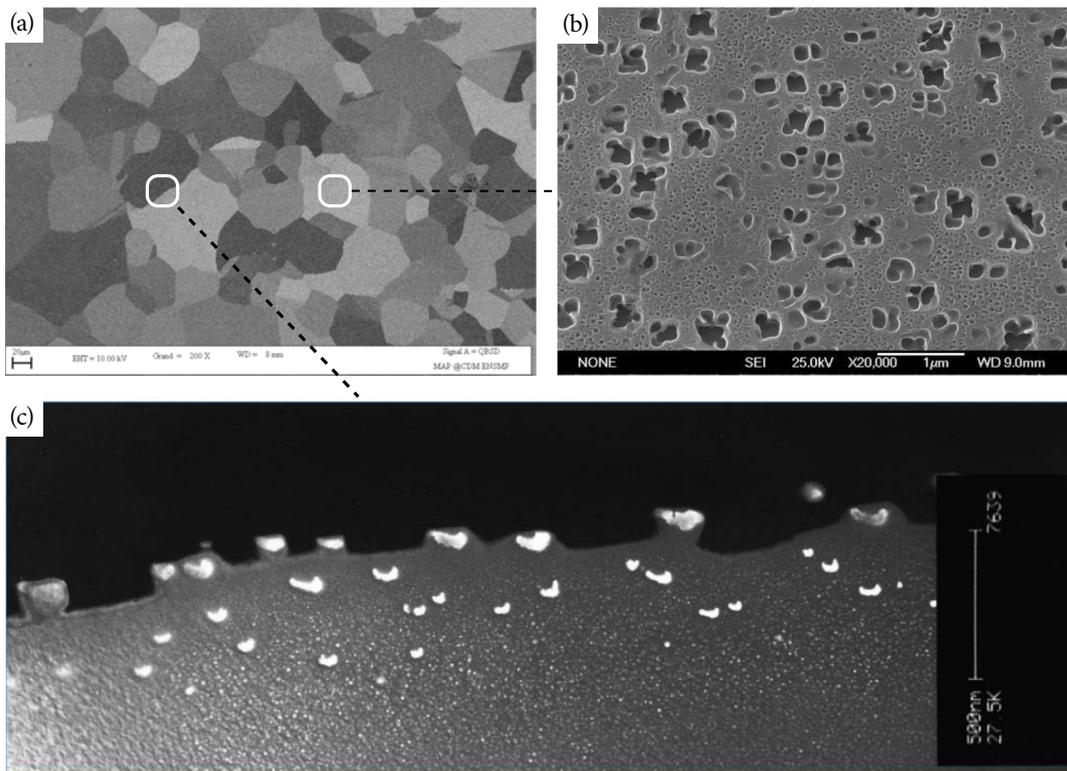


Figure 2.3 — Exemple de microstructure. (a) Micrographie d'un superalliage à base de nickel montrant, en niveaux de gris, les grains d'orientation différente.⁵² La barre d'échelle en bas à gauche représente 20 μm. (b) Microstructure à l'intérieur d'un grain, montrant l'existence d'une autre phase plus sombre précipitant sous forme de petites particules (barre d'échelle de 1 μm en bas à droite).⁵³ (c) Des précipités se formant dans le joint entre deux grains (barre d'échelle de 500 nm à droite).⁵⁴

La maîtrise de la microstructure est vitale pour concevoir des matériaux performants. Celle-ci conditionne en effet directement les propriétés d'un alliage. À titre d'exemple, la présence dans les aciers de carbures de fer, une phase ordonnée durcissante, améliore sensiblement leur résistance mécanique ; c'est un exemple de renforcement dit « par précipitation ». *A contrario*, la plupart des bronzes riches en cuivre sont monophasés : dans ce cas, le cuivre et l'étain forment une solution solide de substitution, plus résistante que le cuivre pur ; le renforcement est alors dit « par solution solide ». De tels phénomènes de renforcement se constatent dans la plupart des familles d'alliages, que ce soient les alliages à base d'aluminium, de cuivre, de fer, de nickel ou de titane. Des phénomènes inverses peuvent survenir s'il existe des phases dites fragilisantes, dont la présence conduit à un amoindrissement de certaines propriétés.

La constitution d'un alliage, c'est-à-dire le nombre et la nature des phases présentes en son sein, est décrite par les diagrammes de phases. Ces diagrammes proposent une cartographie des domaines de stabilité des phases en fonction de la composition de l'alliage et de variables extérieures telles la température et la pression (aussi dénommées variables d'état). Un exemple simple d'un tel diagramme est donné dans le cas d'un alliage binaire argent-cuivre, à pression atmosphérique

(figure 2.4). Six domaines sont délimités, chacun existant dans certaines plages de température et de teneur en cuivre.

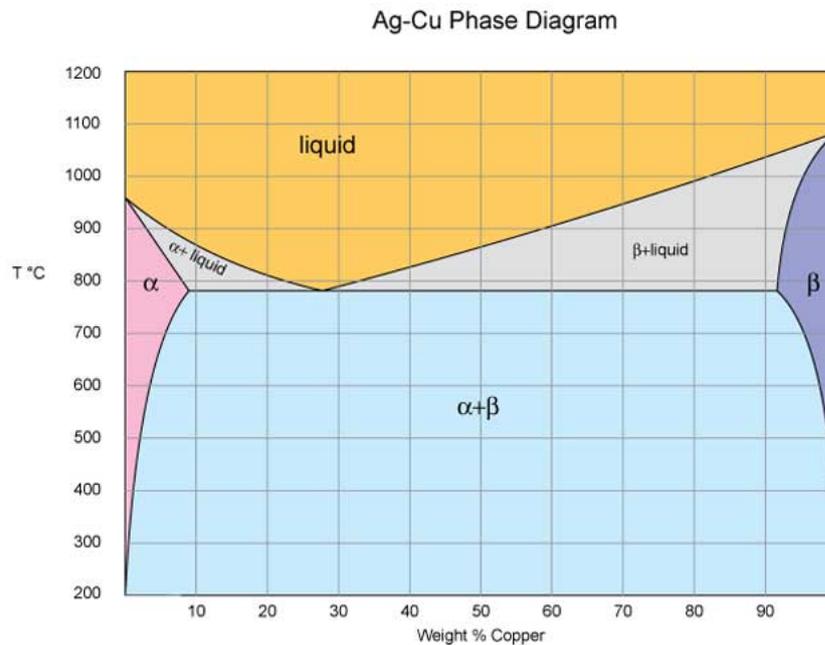


Figure 2.4 — Diagramme de phases binaire argent-cuivre. La teneur en cuivre varie suivant l'axe des abscisses, tandis que la température augmente selon l'axe des ordonnées. Les lignes délimitent les domaines de stabilité de différentes phases.

Les diagrammes de phases sont de puissants outils pour la conception d'alliages. Une fois l'étape d'exploration des gammes de composition et de température complétée, les domaines de stabilité de chaque phase peuvent être isolés. Ainsi, un concepteur d'alliage peut ensuite, sans avoir à répéter d'expérimentations, sélectionner la proportion d'un élément d'addition adéquate pour l'obtention d'une constitution adaptée à ses besoins, et offrant la possibilité de générer la microstructure désirée. Un grand nombre de systèmes binaires et ternaires ont été cartographiés au cours du siècle dernier,⁵⁵ rendant possible la prédiction de la constitution d'alliages variés à tout utilisateur étranger à la détermination même des diagrammes.

Un problème survient cependant lorsque sont considérés des alliages complexes comptant un grand nombre d'éléments d'addition. Ces matériaux multicomposants s'éloignent des simples systèmes binaires (comme celui de la figure 2.4) ou ternaires. La détermination de leur diagramme de phases est ardue pour la même raison que leur conception est difficile : le nombre d'alliages qu'il est nécessaire de caractériser pour délimiter chaque domaine dans les diagrammes est immense. En effet, si la construction de diagrammes binaires ne requiert que le parcours de deux axes (teneur d'un élément et température), celle des diagrammes à n composants demanderait le parcours simultané et quasi-systématique de n dimensions ($n - 1$ éléments et la température). En conséquence, la description de la constitution d'alliages multicomposants demeure encore aujourd'hui incomplète en de nombreux domaines de compositions.

2.1.1 Méthode de calcul des diagrammes de phases à l'équilibre : l'approche CALPHAD

La méthode CALPHAD (*CAL*culat*ion of PHASE* Diagrams, calcul des diagrammes de phases) a été développée dans le but de contourner ce problème.¹ Parfois dénommée *computer coupling of phase*

diagrams and thermochemistry (couplage informatique des diagrammes de phases et de la thermo-chimie), cette approche consiste en la modélisation des données thermodynamiques majoritairement amassées sur les systèmes binaires et ternaires dans l'optique de les extrapoler à des systèmes de dimensions plus élevées. Plus précisément, la méthode CALPHAD s'intéresse à une des grandeurs thermodynamiques caractéristiques d'une phase, l'énergie libre de Gibbs, qu'elle modélise en fonction de la composition des systèmes étudiés et des variables d'état. La méthode CALPHAD propose ainsi la détermination de l'énergie libre de Gibbs G d'une phase *via* la relation :

$$G = G^0 + G^{\text{idéal}} + G^{\text{ex}} \quad (2.1)$$

Avec :

- G^0 la somme pondérée des énergies libres de Gibbs G_i^0 de tous les constituants i de la phase alors considérés à l'état pur et dont les fractions sont x_i :

$$G^0 = \sum_i x_i G_i^0; \quad (2.2)$$

- $G^{\text{idéal}}$ la contribution de l'entropie de mélange d'une solution idéale :

$$G^{\text{idéal}} = RT \sum_i x_i \ln(x_i), \quad (2.3)$$

R étant la constante des gaz parfaits et T la température absolue (la quantité $-R \sum_i x_i \ln(x_i)$ est appelée entropie de configuration);

- G^{ex} l'énergie libre d'excès, qui provient du fait que les espèces exercent entre elles diverses interactions (chimiques, magnétiques, etc.).

Les grandeurs G^0 et G^{ex} sont ajustées par rapport aux données expérimentales, sur la base de fonctions empiriques des variables d'état. En outre, le terme G^{ex} est assez complexe et prend diverses formes mathématiques selon les phases considérées, dont il est entre autres une fonction de la composition.⁵⁶ Il est adapté vis-à-vis de la composition de manière à prendre en compte les interactions à deux ou trois éléments; les interactions d'ordre supérieur sont le plus souvent ignorées car considérées comme négligeables.

Pour déterminer les phases présentes dans un système multicomposants à l'équilibre, l'approche CALPHAD procède au calcul de l'énergie libre de Gibbs de chaque phase susceptible de se former avec les éléments d'alliage, par extrapolation des modèles d'énergie libre établis à partir des systèmes binaires et ternaires. Ces calculs sont fiables moyennant la compilation d'un nombre suffisant des diagrammes de phases d'ordre deux et trois, dont la détermination et la vérification sont plus aisées; leur nombre peut néanmoins atteindre respectivement $\binom{2}{x}$ et $\binom{3}{x}$ pour un système à x composants. La somme de l'énergie libre de Gibbs, G_p , de chaque phase p , pondérée par sa quantité n_p , résulte alors en l'énergie libre totale molaire du système selon la relation :

$$G = \frac{1}{n} \sum_p n_p G_p \quad (2.4)$$

avec n le nombre total de moles d'atomes dans l'alliage.

L'équilibre thermodynamique intervenant, à température fixe, pour une énergie libre de Gibbs totale minimale, CALPHAD opère une minimisation numérique de la somme afin de déterminer les phases préférentiellement formées, en cherchant la répartition des atomes dans les différentes phases qui conduit à la valeur de G la plus faible possible.

L'appellation CALPHAD englobe aussi bien la compilation sous forme de bases de données des propriétés thermodynamiques nécessaires à la régression, déterminées expérimentalement ou analytiquement, que leur intégration au sein de programmes informatiques permettant leur exploitation. La fiabilité de la technique est donc conditionnée par la validité des bases de données sous-jacentes, dont la vérification est cruciale.

Plusieurs logiciels commerciaux implémentant la méthode CALPHAD sont disponibles aujourd'hui, les principaux étant FactSage,⁵⁷ JMatPro,⁵⁸ MatCalc,⁵⁹ MTDData,⁶⁰ Pandat⁶¹ et Thermo-Calc.^{62,63} Dans le cadre de ce travail, il est fait usage exclusif du logiciel Thermo-Calc.

2.1.2 CALPHAD pour la conception d'alliages

La thermodynamique prédictive de type CALPHAD est en mesure de fournir une estimation fiable et rapide de paramètres thermodynamiques pertinents dans le contexte de la conception d'alliages. À partir de leur composition nominale, de la température et de la pression, elle permet en effet l'estimation :

- de la nature, de la composition et de la fraction des phases à l'équilibre ;
- de grandeurs thermodynamiques à l'équilibre : l'enthalpie, l'entropie et l'énergie libre de Gibbs du matériau et des phases le constituant, le potentiel chimique ou l'activité des éléments d'addition ;
- de grandeurs « hors équilibre » ou liées à des processus dynamiques : la force motrice de formation d'une phase, les coefficients de diffusion en couplage avec des bases de données de mobilités atomiques, etc.

Le recours à la thermodynamique prédictive permet notamment de s'assurer de la possibilité de générer les microstructures *a priori* adaptées aux applications visées. L'exercice de ce contrôle sur la microstructure à l'équilibre des alliages est crucial car celle-ci influe largement sur leurs propriétés thermomécaniques et thermochimiques.

En particulier, les matériaux destinés à des applications à hautes températures bénéficient d'une telle approche. À l'issue de leur fabrication, ils possèdent une microstructure qui leur confère certaines propriétés. Si cette microstructure n'est pas constituée de phases à l'équilibre à la température d'utilisation, une exposition prolongée aura tendance à faire évoluer la constitution vers celle d'équilibre, modifiant la microstructure initiale en faisant éventuellement apparaître de nouvelles phases indésirables dégradant potentiellement les propriétés. Il est donc important de donner le moins de chances possible à la nature de s'éloigner de la microstructure initiale et donc de concevoir d'entrée de jeu des alliages à la microstructure stable.

La résistance à la corrosion dépend aussi de la microstructure : par exemple, la protection des aciers inoxydables provient de l'oxydation sélective du chrome dissous dans la matrice de l'acier, qui forme en surface une couche d'oxyde passivante protégeant le métal de l'environnement corrosif. Si la formation de phases détournant ce chrome n'est pas limitée, la protection du métal est compromise. La formation de carbures de chrome aux joints de grains est ainsi un des mécanismes principaux de la corrosion dite « intergranulaire. »

Avec la thermodynamique prédictive, l'ajustement de la composition d'un alliage prend ainsi une tournure « d'ingénierie des microstructures » : une fois un cahier des charges établi, un concepteur peut sélectionner les phases désirables et rechercher ensuite une composition permettant leur obtention. Réaliser une prédiction CALPHAD est rapide : un calcul pour un alliage à dix composants ne requiert au maximum que quelques secondes, souvent seulement quelques dizaines de millisecondes. L'exploration automatique de nombreuses compositions, par exemple à l'aide

de métaheuristiques mentionnées dans le [chapitre 1](#) et dont certaines seront décrites ultérieurement, devient donc possible dans des temps raisonnables (quelques mois au plus), avec à la clé une composition conduisant à une constitution « sur mesure » offrant une certaine garantie de performances. Cette célérité distingue la méthode CALPHAD d'autres approches calculatoires telles les méthodes *ab initio*, les champs de phase, la dynamique moléculaire (MD) ou la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), dont le recours à des fins de conception automatique d'alliages complexes est compromis par des temps de calculs rédhibitoires.

Au cours des précédentes décennies, la thermodynamique prédictive a assisté le développement de nombreux matériaux novateurs. Elle a permis l'ajustement de la composition d'aciers résistants au fluage^a ferrito-martensitiques^{14,28} ou austénitiques⁶⁴ dans le but d'y former des précipités bénéfiques (carbures, phases de Laves, particules riches en cuivre, etc.) en évitant la formation de phases dégradant leurs propriétés (phases δ , σ , etc.). Elle a également été exploitée pour trouver, en plus des compositions idéales, les températures adéquates de fin de transformation martensitique¹⁸ et de traitements thermiques de normalisation,¹⁰ de vieillissement,^{36,65} d'austénitisation⁶⁶ et de mise en solution.⁶⁷ Elle a permis de prendre en compte l'effet du maintien à la température de service.⁶⁸ Dans certains travaux, CALPHAD fournit aussi des paramètres (nature et proportion des constituants) à des modèles de renforcement par solution solide⁶⁹ et par précipitation,⁶⁸⁻⁷¹ ou à des modèles de croissance de précipités,⁷² ce qui facilite la découverte de compositions maximisant l'efficacité des renforcements.

Certains aciers spéciaux ont aussi profité de l'approche CALPHAD. Dans le cadre du développement d'aciers bainitiques, son utilisation a permis d'isoler les domaines de formation d'une bainite appauvrie en carbone et d'assurer la nanostructuration des lamelles de celle-ci en s'intéressant notamment aux forces motrices.²² Des aciers destinés à l'industrie nucléaire ont été conçus en trouvant un compromis acceptable entre durcissement et faible énergie d'activation neutronique.³⁸ Des critères thermodynamiques régissant la constitution d'aciers résistants à l'abrasion ont également été énoncés.⁷³ Guo *et al.*²⁵ ont utilisé la méthode CALPHAD afin d'ajuster les teneurs en éléments carburigènes (chrome, molybdène, vanadium, tungstène) dans des aciers rapides.

La thermodynamique prédictive a aussi contribué à raccourcir les temps de développement de superalliages à base de nickel, en permettant d'identifier et d'éviter les domaines de compositions susceptibles de favoriser l'apparition de phases délétères.^{11,12,21,30,74,75} Certains de ces travaux illustrent l'exploitation industrielle de la méthode CALPHAD, qui a mené à la conception d'alliages désormais commercialisés tels l'AD730⁷⁴ et les Inconel 740 et 740H.⁷⁵ CALPHAD a joué un rôle important dans le développement de ces alliages en offrant la possibilité de régler le ratio aluminium-titane afin d'améliorer la stabilité des précipités γ' (et donc d'éviter la formation de la phase η). L'axe de conception de superalliages peu onéreux a également été exploré.^{15,76,77} Dans ces travaux, l'accent est mis sur l'obtention d'un compromis entre résistance au fluage et coût; la recherche de compositions adéquates n'est donc conduite que sur un nombre d'éléments réduit, le recours aux éléments les plus chers étant proscrit. Des contraintes similaires sont établies dans les travaux de Tancret,³⁷ où est étudié le compromis entre addition croissante de fer (donc réduction du coût) et précipitation de la phase renforçante γ' . Pour les superalliages aussi, CALPHAD peut fournir des paramètres d'entrée de modèles d'évolution microstructurale comme par exemple la recristallisation dynamique.⁷⁸ Enfin, Crudden *et al.*²³ ont usé de la méthode CALPHAD pour calculer les énergies de fautes d'empilement de superalliages dans le but d'estimer leur résistance mécanique.

L'exploration de systèmes à composants principaux multiples et la découverte de nouveaux alliages à forte entropie aidées par CALPHAD ont également été rapportées. Après étude de diagrammes binaires et ternaires, Gao & Alman⁷⁹ ont proposé trois familles potentielles d'alliages à

a. Le fluage désigne une déformation à chaud à long terme, ici dans la gamme de température 500-600 °C.

forte entropie. Miracle *et al.*⁵⁰ usent du calcul des diagrammes de phases comme un outil exploratoire permettant de disqualifier les alliages présentant notamment des transformations de phases sur leur gamme de température d'utilisation. CALPHAD a aussi assisté la recherche d'alliages à forte entropie réfractaires dans le système Hf-Mo-Nb-Ta-Ti-V-Zr.²⁴ Des « superalliages à forte entropie » ont été développés par Yeh *et al.*⁸⁰ en maximisant les teneurs des éléments d'addition dans la matrice de nickel. Néanmoins, l'application de la thermodynamique prédictive pour la conception d'alliages à forte entropie est complexe⁸¹ et sera plus amplement discutée par la suite.

Enfin, la conception assistée par la thermodynamique prédictive d'alliages à base d'aluminium ou de titane a également fait l'objet de travaux (voir par exemple les travaux de Liu).^{82,83}

2.1.3 Description des bases de données thermodynamiques employées dans ce travail

La capacité de la méthode CALPHAD à être appliquée à autant de systèmes métallurgiques provient de la compilation de nombreuses bases de données thermodynamiques. Par exemple, la société *Thermo-Calc Software*, éditrice du logiciel éponyme utilisé ici, commercialise ou distribue des bases de données pour les alliages à base d'aluminium, de fer, de magnésium, de nickel, de silicium, de titane ou de zirconium, ainsi que pour les alliages à forte entropie et les brasures (Pb-Sn-Ag-Cu-Bi-Zn..).

Les bases de données thermodynamiques employées dans ce travail sont brièvement détaillées dans les sections suivantes. Les informations sur ces bases proviennent des fiches techniques éditées par *Thermo-Calc Software*.⁸⁴

2.1.3.1 Alliages à base de nickel

Il existe plusieurs compilations de données thermodynamiques sur les alliages à base de nickel disponibles pour interfaçage avec *Thermo-Calc*, dont les bases de données *Thermo-Calc Software Ni-based superalloys database version 7* (TCNI7)⁸⁵ et *Thermotech TTNI8 Ni-based superalloys database version 8* (TTNI8).⁸⁶ La première base de données est commercialisée par la société *Thermo-Calc Software* elle-même, tandis que la seconde est vendue par l'entreprise *Thermotech Ltd.* (désormais *Sente Software Ltd.*, société éditrice du logiciel *JMatPro*).

Ces deux bases sont dédiées aux superalliages à base de nickel ou nickel-fer, polycristallins ou monocristallins. Elles diffèrent par le nombre d'éléments inclus (26 contre 23) et le nombre de phases décrites (41 contre 54 phases pertinentes pour les superalliages).

Les éléments inclus dans ces bases sont listés dans le [tableau 2.1](#).

Tous les systèmes binaires de la base TCNI7 ont été vérifiés expérimentalement sur tous les domaines de composition, à l'exception des systèmes N-C, N-Hf, N-Pd, N-Pt, N-Re, N-Ru et N-Y. La description de 249 systèmes ternaires validés est également incluse dans la base. De telles statistiques ne sont pas disponibles pour TTNI8 mais les résultats produits par la base ont été éprouvés expérimentalement.⁸⁶

2.1.3.2 Alliages à base de fer

Développée pour les alliages à base de fer, la base de données *Thermo-Calc Software Steels and Fe-alloys database version 8* (TCFE8)⁸⁷ permet le calcul des diagrammes de phases des aciers standards et spéciaux (inoxydables, rapides, à haute limite d'élasticité, résistants à la corrosion ou au fluage, etc.). Elle inclut les 27 éléments suivants : Fe, Al, Cr, Co, Cu, Mn, Mo, Nb, Ni, Si, Ta, Ti, V, W, B, C, Y, Zr, Ca, Mg, P, S, Zn, Ar, H, N, O. Les phases décrites sont trop nombreuses pour toutes les énumérer ici ; une liste détaillée est disponible dans la référence [87](#).

TABLEAU 2.1 — Éléments inclus dans les bases de données thermodynamiques TCNI7 et TTNI8.

Éléments	TCNI7	TTNI8	Éléments	TCNI7	TTNI8	Éléments	TCNI7	TTNI8
Al	✓	✓	Mn	✓	✓	Si	✓	✓
Ar	✓	—	Mo	✓	✓	Ta	✓	✓
B	✓	✓	N	✓	✓	Ti	✓	✓
C	✓	✓	Nb	✓	✓	V	✓	✓
Co	✓	✓	Ni	✓	✓	W	✓	✓
Cr	✓	✓	O	✓	✓	Y	✓	—
Cu	—	✓	Pd	✓	—	Zr	✓	✓
Fe	✓	✓	Pt	✓	✓			
H	✓	—	Re	✓	✓			
Hf	✓	✓	Re	✓	✓			

2.1.3.3 Alliages généraux

La base de données *Scientific Group Thermodata Europe Solutions database version 5 (SSOL5)*⁸⁸ est une compilation de données thermodynamiques de 1262 phases, pouvant servir à la conception d'alliages divers. Elle inclut 78 éléments et repose sur la validation expérimentale de 413 systèmes binaires, 127 systèmes ternaires et de quelques systèmes d'ordre supérieur. La liste complète des éléments et des phases est disponible dans la référence 88.

2.1.4 Synthèse

La méthode CALPHAD est un outil de choix pour la conception d'alliages. En fournissant une prédiction de la constitution à l'équilibre d'alliages multicomposants, elle peut contribuer au contrôle de leur microstructure en s'assurant que celle-ci est adaptée aux conditions de service prévues. Cette maîtrise est particulièrement importante pour concevoir des matériaux spéciaux soumis à des contraintes mécaniques et chimiques sévères tels les aciers ou les superalliages résistants au fluage. La fiabilité de la méthode CALPHAD a été illustrée par de nombreuses validations expérimentales qui ont montré la performance de nouveaux alliages dont elle a assisté le développement.

De surcroît, l'intérêt de la méthode CALPHAD réside dans sa célérité, qui permet l'estimation de la constitution d'un grand nombre d'alliages en un temps réduit comparé à d'autres méthodes analytiques (MD, DFT) ou aux temps de développement d'alliages par essai-erreur. Son interfaçage avec des routines d'optimisation itératives est ainsi réaliste; celui-ci sera opéré dans ce travail avec un algorithme génétique multiobjectifs. Cette combinaison sera notamment appliquée à la conception de superalliages à base de nickel.

Le recours à l'approche CALPHAD pour les alliages à forte entropie, seconde famille d'alliages étudiée dans le cadre de ce travail, est à l'heure actuelle discutable. Ces alliages ne présentant par définition pas d'élément principal, l'emploi d'une base de données centrée sur un seul composant paraît *a priori* inadéquat. Il semble alors logique de procéder aux calculs de leurs diagrammes de phases en exploitant les données thermodynamiques contenues dans plusieurs bases et en croisant leurs résultats. En outre, certains éditeurs de logiciels proposent depuis peu (depuis 2015 pour Thermo-Calc et Pandat) des bases de données dédiées à ces alliages. Ces divers aspects seront discutés ultérieurement dans le [chapitre 4](#) portant sur la conception d'alliages à forte entropie.

2.2 Fouille de données pour la prédiction de caractéristiques d'alliages

L'association d'éléments au sein d'un alliage conduit généralement à la modification de ses propriétés, qu'il est nécessaire de quantifier afin d'estimer son potentiel. Cette caractérisation est souvent opérée de manière expérimentale dans le cadre de l'approche essai-erreur, avec pour inconvénient principal l'obligation de fabriquer et d'évaluer de nombreux matériaux. Néanmoins, les données expérimentales ainsi collectées au cours du siècle dernier ont permis la qualification de nombreux alliages industriels. Elles ont également servi de base à de multiples travaux relevant du domaine de la métallurgie physique, qui ont notamment rendu possibles la théorisation et la modélisation de certains mécanismes par lesquels les propriétés d'alliages sont altérées.

Cependant, la prédiction des caractéristiques d'un alliage par des modèles de métallurgie physique constitue un exercice laborieux. En effet, toutes les propriétés macroscopiques pertinentes dans le cadre de la conception d'alliages peuvent différer de celles du métal de base : propriétés physiques, chimiques, mécaniques, électriques, magnétiques, thermiques, etc. Les mécanismes intrinsèques menant à ces changements sont nombreux : par exemple, certaines propriétés mécaniques sont améliorables *via* un renforcement par solution solide, par précipitation ou par dispersion de phases secondaires, par diminution de la taille des grains ou par écrouissage. Ces mécanismes dépendent de façon non linéaire de multiples facteurs, dont la composition, les paramètres de traitements thermiques ou thermomécaniques (durées, températures, vitesses de refroidissement, etc.) et la microstructure (constitution, morphologie des phases, taille des grains). Dans le meilleur des cas, l'influence individuelle de ces variables sur les propriétés peut être mesurée et modélisée, comme peuvent l'être des interactions simples à deux ou trois variables ; cependant, la corrélation simultanée des propriétés avec tous ces paramètres est généralement impossible. Le grand nombre de mécanismes à décrire, combiné à l'étendue des paramètres à prendre en compte, signifie ainsi que l'établissement d'une théorie métallurgique universelle quantifiant l'influence de la composition et de la microstructure sur les propriétés macroscopiques est encore hors d'atteinte.

Une alternative consiste à exploiter les données expérimentales à l'aide de modèles phénoménologiques et non pas théoriques. En effet, la recherche de corrélations au sein d'observations peut être dévolue à des algorithmes provenant du domaine de « l'exploration » ou de la « fouille » de données (en anglais : *data mining*, *machine learning*). De façon générale, ces algorithmes recherchent automatiquement un modèle capable d'exprimer au mieux la relation entre une variable cible et des variables dites explicatives. Ce modèle peut prendre diverses formes, dont celle d'une fonction d'approximation. Les interdépendances mises en évidence ne sont pas obligatoirement linéaires : à partir d'observations expérimentales, ces méthodes peuvent permettre de relier les nombreux paramètres déterminant certaines caractéristiques d'alliages — composition, traitements thermiques, microstructure — directement aux propriétés macroscopiques, sans nécessité d'une description théorique complète des mécanismes sous-jacents. Cette approche n'est pour autant pas dénuée de sens physique, les modèles étant notamment jugés selon leur adéquation avec les tendances « métallurgiques » générales connues. Ces algorithmes sont donc à même de modéliser les interactions entre paramètres constitutifs et propriétés macroscopiques d'alliages multicomposants. Une fois déterminée, la fonction d'approximation peut être exploitée pour prédire la valeur de propriétés en des points autres que ceux de la base de données à partir desquelles elle a été établie. Cette capacité prédictive rend avantageuse l'usage de ces méthodes pour estimer les performances d'alliages à la composition inédite.

Parmi les algorithmes communément employés pour associer les propriétés en température d'alliages à leur composition, leurs traitements thermiques ou leur microstructure se trouvent les réseaux de neurones artificiels, la programmation génétique, les machines à vecteur de support et

les processus gaussiens. Les sections suivantes décrivent brièvement ces méthodes et présentent un résumé de leurs applications en métallurgie.

2.2.1 Réseaux de neurones artificiels

Les réseaux de neurones artificiels⁸⁹ sont une méthode de régression générale permettant la modélisation d'une quantité par une combinaison de fonctions non linéaires. Le fonctionnement d'un neurone formel basique peut être expliqué à partir d'une représentation graphique en réseau de la régression linéaire (figure 2.5).⁹⁰ Dans ce graphe, la sortie est la résistance à la traction d'un alliage, R_m , devant être décrite en fonction des teneurs en trois éléments d'alliage (aluminium, titane et tungstène) constituant les entrées a_i . Pour effectuer cette régression, il est nécessaire d'avoir construit une base de données contenant des mesures de R_m pour différentes teneurs en aluminium, titane et tungstène. La régression linéaire consiste alors à trouver des poids w_1 , w_2 et w_3 et une constante ϑ adéquats afin que leur combinaison linéaire avec les entrées représente correctement ces mesures. Dans le cadre de la fouille de données, cette recherche des paramètres est dénommée « apprentissage ».

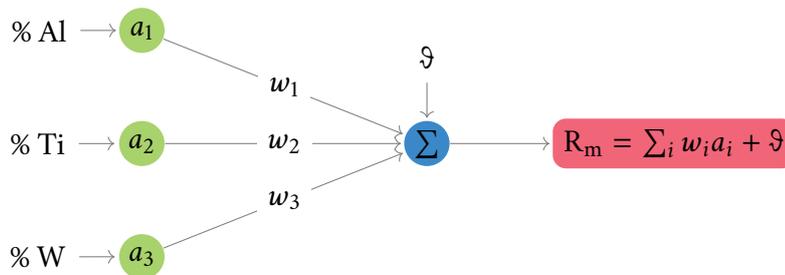


Figure 2.5 — Représentation graphique en réseau de la régression linéaire.

Cette forme de régression n'est pas adaptée à la modélisation des propriétés d'alliages dont l'évolution sur de larges gammes de composition n'est généralement pas linéaire et parfois pas monotone, et où des interactions existent souvent entre variables. À l'inverse, cette complexité peut être intégrée en insérant dans le modèle des opérateurs non linéaires et en les organisant en réseaux de manière à pouvoir prendre en compte les interactions entre variables; les réseaux de neurones artificiels sont un exemple de tels modèles. Ces réseaux reproduisent le fonctionnement d'un système nerveux biologique constitué d'un ensemble de neurones qui forment un vaste réseau interconnecté. Les neurones naturels communiquent entre eux *via* des signaux électrochimiques dont l'intensité est fonction de l'importance des signaux reçus. Les réseaux de neurones artificiels reproduisent ce schéma : un neurone y est représenté par un nœud dont la réponse (le signal de sortie calculé) dépend de l'intensité des signaux qui lui sont envoyés (les entrées). Cette réponse peut être modélisée par une fonction d'activation. Plusieurs types de fonctions ont été proposés, dont la fonction de Heaviside et la famille des fonctions sigmoïdales (fonction logistique ou fonction tangente hyperbolique par exemple); ces dernières possèdent une forme ressemblant à la réponse électrochimique d'un neurone biologique (figure 2.6).

La modélisation de données non linéaires devient possible en combinant linéairement plusieurs fonctions sigmoïdales; par exemple, l'addition de trois fonctions tangentes hyperboliques de paramètres différents peut conduire au résultat de la figure 2.7.

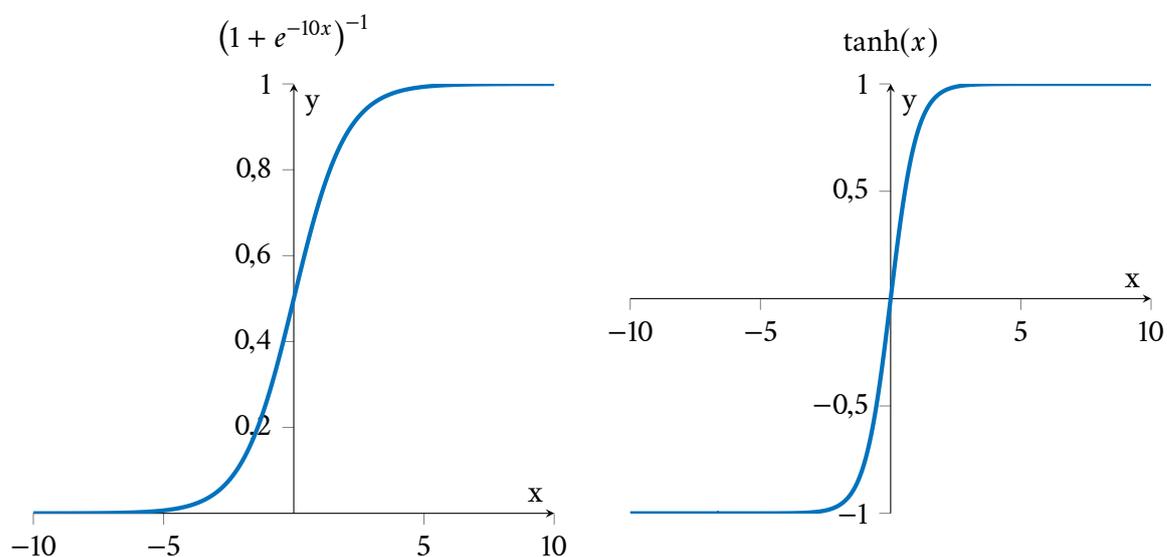


Figure 2.6 — À gauche : fonction logistique. À droite : fonction tangente hyperbolique.

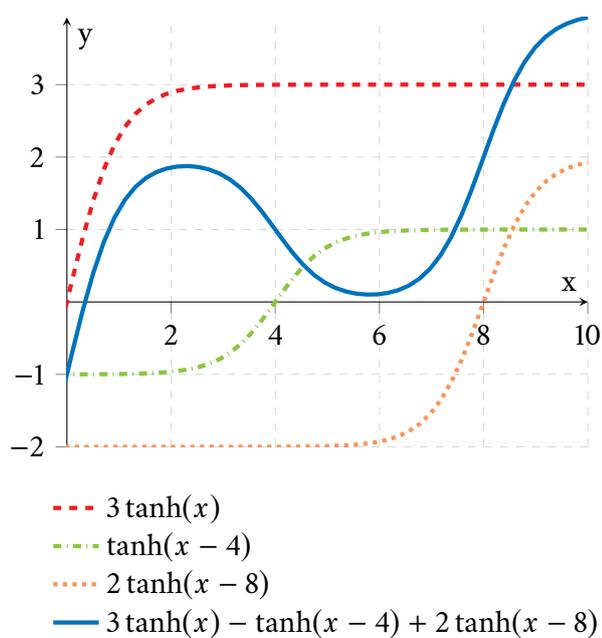


Figure 2.7 — Somme de trois fonctions tangentes hyperboliques, représentées séparément en pointillés.

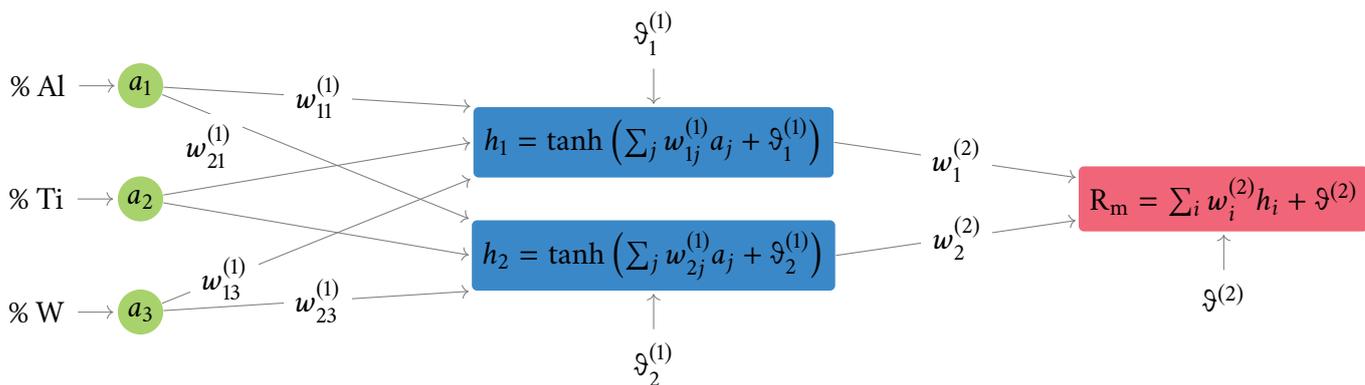


Figure 2.8 — Représentation d'un réseau de neurones artificiels de type perceptron multicouches. Les neurones sont symbolisés par les nœuds centraux.

La [figure 2.8](#) illustre une importante sous-classe des réseaux de neurones artificiels : les perceptrons multicouches.⁹¹ Dans ce réseau, les opérations intermédiaires (dont les résultats sont h_1 et h_2) représentent des neurones.

Ces neurones artificiels calculent chacun une fonction sigmoïdale paramétrée par une combinaison linéaire des entrées. Les poids conférés à ces fonctions quantifient l'importance de celles-ci vis-à-vis de la sortie du réseau. Le nombre de fonctions permet d'ajuster la complexité du modèle (caractère non linéaire ou non monotone, interactions entre variables). Aux yeux d'un utilisateur, les opérations intermédiaires amenant au résultat ne sont pas visibles; les nœuds centraux du réseau (en bleu sur les figures [2.5](#) et [2.8](#)) sont ainsi désignés « nœuds cachés »— cette appellation constitue un abus de langage dans la mesure où tous les paramètres d'un modèle sont évidemment accessibles. Selon la complexité des données à approximer, plusieurs couches de nœuds cachés peuvent être employées; un réseau peut ainsi être composé d'un nombre potentiellement illimité de neurones. De la même manière que dans le cas de la régression linéaire, « l'apprentissage » du modèle sous-entend l'ajustement des poids et constantes du réseau par rapport aux observations; il est souvent opéré par un algorithme dit de « rétropropagation » des erreurs⁹² qui adapte ces paramètres en fonction de l'écart entre valeurs réellement mesurées et valeurs prédites par le réseau (la possibilité d'un pilotage statistique de l'apprentissage sera évoquée ultérieurement).

Les réseaux de neurones artificiels, et plus particulièrement les perceptrons multicouches, ont été largement appliqués au domaine de la métallurgie. La littérature abonde de travaux visant à estimer les propriétés macroscopiques d'alliages à partir de leur composition, de leur microstructure (souvent prise en compte de façon implicite par le biais des paramètres des traitements thermomécaniques) et de la température. Certaines des applications sont présentées ci-après, illustrant leur diversité.

Les réseaux de neurones ont été exploités pour modéliser les propriétés en traction de diverses familles d'alliages, dont :

- la résistance à la traction;
- la limite d'élasticité;
- l'allongement à la rupture;
- le coefficient de striction.

Ces propriétés ont été modélisées pour différents alliages métalliques, dont :

- des aciers^{39,93–99} (voir, à titre d'exemple, la [figure 2.9](#));

- des alliages d'aluminium^{46,100} ;
- des alliages de nickel^{4,21,31,101} ;
- des alliages de titane^{13,34} ;
- des alliages de cuivre.¹⁰²

La figure 2.9 illustre la flexibilité des réseaux de neurones exploités pour prédire l'évolution non linéaire de la résistance à la traction d'un acier renforcé par précipitation d'oxydes en fonction de la température.

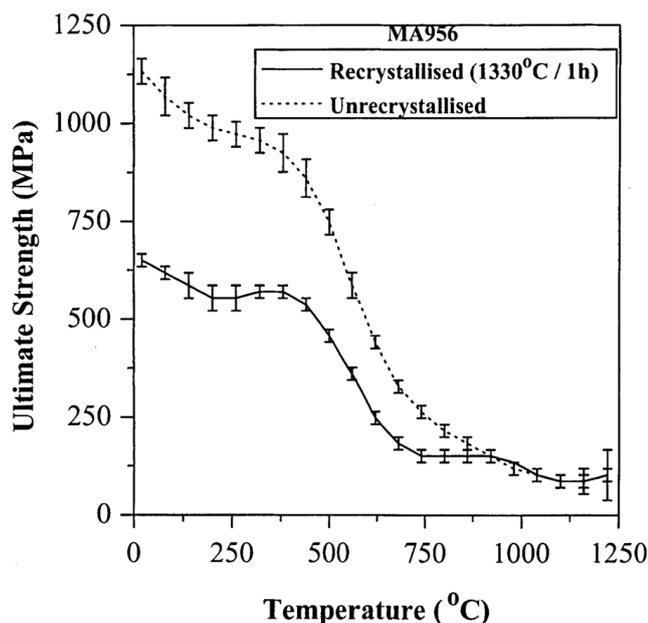


Figure 2.9 — Évolution prédite par des réseaux de neurones artificiels de la résistance à la traction d'un acier renforcé par précipitation d'oxydes en fonction de la température. Les barres d'erreur représentent l'incertitude du modèle. Figure tirée de la référence 94.

Des modèles de tenue au fluage ont également été formulés pour des aciers^{10,16,103} et des superalliages à base de nickel.^{17,31,44,101,104}

La ténacité d'aciers a également été modélisée.^{3,43,45,95,98,105} Malinov *et al.*¹⁰⁶ ont établi un modèle similaire concernant les alliages de titane. Les cinétiques de propagation de fissures dans des superalliages ont aussi été approximées.¹⁰⁷ Des réseaux de neurones ont permis de modéliser la tenue en fatigue de superalliages à base de nickel^{31,101,104} et d'alliages de titane.¹⁰⁸

Les températures de début et de fin de transformation allotropique dans divers aciers ont également été corrélées à la composition et aux traitements thermiques.¹⁰⁹⁻¹¹²

L'effet des rayonnements ionisants sur les propriétés mécaniques d'aciers à faible activation neutronique a aussi fait l'objet de travaux : Kemp *et al.*¹¹³ ont étudié l'évolution de la limite d'élasticité et Cottrell *et al.*¹¹⁴ celle de la tenue au choc et de la température de transition ductile-fragile.

D'autres caractéristiques d'alliages ont été analysées à l'aide de réseaux de neurones :

- la susceptibilité à la fissuration à chaud dans certains aciers lors du soudage^{115,116} ;
- la prédiction de la fraction d'austénite résiduelle dans des aciers TRIP (*TRansformation Induced Plasticity*)^{20,117} ;
- la simulation du nombre de trous d'électrons moyen pour estimer la propension de superalliages à base de nickel à former des phases topologiquement compactes indésirables¹¹⁸ ;

- la conductivité thermique d'aciers¹¹⁹ ;
- la dureté d'aciers¹³ et d'alliages de magnésium¹²⁰ ;

Enfin, des réseaux de neurones ont permis l'analyse de la résistance à la corrosion d'alliages de titane¹⁰⁸ et de magnésium.¹²⁰

La popularité des réseaux de neurones artificiels provient notamment de leur relative simplicité mathématique. Néanmoins, leur implémentation présente quelques difficultés, la principale résidant dans l'obtention d'un compromis acceptable entre la complexité du réseau (le nombre et la nature des nœuds cachés) et sa capacité à généraliser, c'est-à-dire à produire des prédictions fiables dans des situations inconnues. Un nombre trop faible de nœuds cachés ne permet pas la modélisation correcte des observations en empêchant l'encodage de suffisamment d'interactions. À l'inverse, un nombre trop élevé de nœuds conduit à un surajustement (ou surapprentissage) du réseau par rapport aux données : disposant d'un grand nombre de fonctions non linéaires, le modèle apprend à décrire toutes les données qui lui sont fournies. En conséquence, la fonction d'approximation résultante tend à passer par tous les points expérimentaux (*overfitting*, figure 2.10) même si cela revient à décrire du « bruit » dans les données au sens statistique du terme — par exemple du bruit inhérent à toute mesure expérimentale. Cette précision est acquise au détriment de la généralisation : le modèle ne sera en effet pas en mesure d'identifier une tendance n'ayant pas été encodée dans les données expérimentales.¹²¹

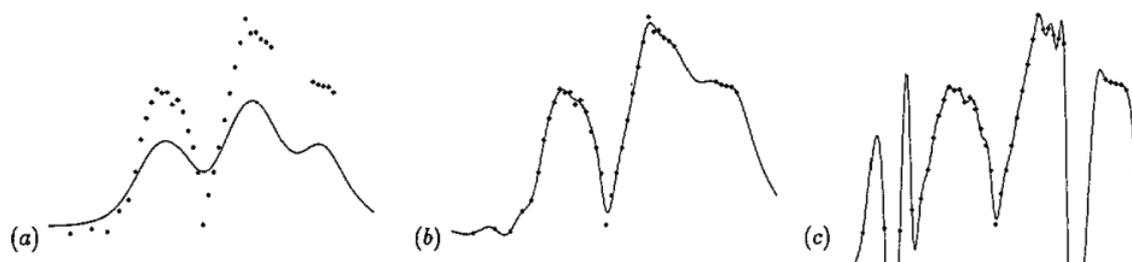


Figure 2.10 — Régression de données bidimensionnelle par trois modèles de réseaux de neurones de complexité croissante. (a) Complexité insuffisante pour correctement décrire les données. (b) Complexité correcte. (c) Complexité excessive : le modèle surajuste et décrit strictement toutes les données; la forme de la fonction d'approximation implique qu'une interpolation sera probablement incorrecte. Figure tirée de la référence 121.

Un traitement probabiliste de type bayésien de l'apprentissage des paramètres peut permettre de contrebalancer adéquatement la complexité et la précision d'un réseau.¹²² D'autres méthodes permettant une adaptation automatique de la complexité ont également été proposées comme, par exemple, la programmation génétique, développée dans la section suivante.

2.2.2 Programmation génétique

La programmation génétique¹²³ consiste en la construction de fonctions complexes à partir de « blocs » élémentaires correspondant à des opérations mathématiques (opérateurs arithmétiques ou fonctions). En jouant sur le nombre, le type et l'ordre des blocs ainsi que leurs liens avec les entrées, il devient possible de modéliser l'évolution de données arbitraires.

Les fonctions générées peuvent être des réseaux (analogues d'une certaine manière aux réseaux de neurones artificiels), mais sont plus généralement des arbres constitués de nœuds symbolisant les entrées, les sorties et les opérations intermédiaires (figure 2.11). La programmation génétique construit plusieurs fonctions en parallèle. Cet ensemble de fonctions forme une « population » qui

évolue pendant plusieurs « générations » selon des variations dites « génétiques » inspirées de la théorie de l'évolution de Darwin. En cela, ces algorithmes sont proches des algorithmes génétiques dont le fonctionnement sera explicité dans la section suivante.

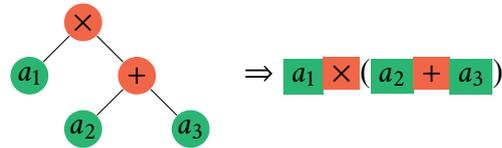


Figure 2.11 — Exemple simpliste d'une fonction générée par programmation génétique. L'arrangement des nœuds s'effectue de manière itérative selon l'adéquation de la fonction avec les données d'apprentissage.

Chaque fonction dans la population est ainsi représentée par une structure unique combinant diverses opérations. La programmation génétique fait progressivement évoluer ces réseaux, de telle manière qu'ils approximent de mieux en mieux les observations. La performance des modèles peut par exemple être jugée par l'erreur entre les données réelles et les prédictions mais également par la complexité des programmes — par exemple le nombre de nœuds des réseaux.

L'assistance de la programmation génétique a permis la formulation de relations directes entre composition, paramètres de traitements thermiques et propriétés macroscopiques : par exemple, la résistance au fluage de superalliages à base de nickel,⁴⁰ la capacité de pliage de tôles de zinc faiblement allié¹²⁴ (figure 2.12) ou la température de transformation martensitique dans des alliages à mémoire de forme Fe-Mn-Si.¹²⁵

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{X5} \left(X6 + X7 - \frac{2X9}{-X5 + \frac{X9}{X5}} + \frac{X9}{X5(-2X3 + X5 - X9 + \frac{X9}{X2X3} + \frac{X9}{X2X5})} + \frac{2X3 + X5 + \frac{1}{X2(-\frac{1}{X2^2} + X5)} + 2X9 + \frac{X3+X9}{X5}}{-X9 + \frac{X9}{(X2+2X3)X5}} \right. \\
 & + \frac{X9}{7X3 + X5 + X9 - \frac{X9}{X5} - \frac{X9}{X2X5} - \frac{X9}{\frac{X2}{X3+X5} - X9} - \frac{2X3+X9}{X5}} + \frac{-X3 + X9 + \frac{X3+X9}{X5}}{-X9 + \frac{X9}{X2X5} - \frac{X9}{-X9 + \frac{X9}{X2X5}}} + \frac{1 + \frac{1}{X2^2} + X5 + \frac{X9}{X2(X5 + \frac{X9}{X3})}}{-X3 + X5 + \frac{X3+X5+X9}{-X3-X9 + \frac{X9}{X2X5}}} \\
 & \left. + \frac{X9}{-1 - \frac{1}{X2} - X3 - X9 - \frac{X9}{X5} - \frac{X9}{X2(X3 + \frac{X9}{X3})} + \frac{2X9}{-X5 + \frac{X9}{X3+X5}}} + \frac{X3 - X5 + X9 + \frac{X9}{X2X5}}{X3 + \frac{X9}{X5} + \frac{X9}{X3+X9} - \frac{X9}{-X3-X5 + \frac{X9}{X5}} + \frac{X9 + \frac{X3+X9}{X5-X9}}{X2X5}} \right) \\
 & - X3 + X5 + X9 + \frac{-2X3+X5+X9 + \frac{X9}{X2X5} + \frac{1}{X2(-X9 + \frac{X9}{X5})} - \frac{-X3-X9 + \frac{X9}{2X3+X5}}{-X3 + \frac{X9}{X2X5}}}{1+X2+X3 - \frac{X9}{X2X5} + \frac{X3+X9}{(X2+2X3)X5} - \frac{2X3+X9 + \frac{X9}{X5}}{-X9 + \frac{X9}{X2X5}}} + \frac{X9}{-X3-X9 - \frac{X9}{-X9 + \frac{X9}{X2X5}} + \frac{X9 + \frac{X3+X5+X9}{X3+X5-X9}}{X2X5}} \\
 & - 2X3 - X5 - \frac{X9}{X3+2X5+X9 - \frac{X9}{X2X5} - \frac{X9}{X3+X9} - \frac{X3+X9}{X5} - \frac{X3+X9}{X2(X3+X5)}} + \frac{X9 + \frac{X3+X9}{X5+X9 - \frac{2X3+X9}{(X2+X3)X5}}}{-X5 + \frac{X9}{X5}}
 \end{aligned}$$

Figure 2.12 — Un modèle généré par programmation génétique décrivant la capacité de pliage de tôles de zinc en fonction de six variables X_i dont la composition nominale (Cu, Fe, Ti) et les temps et température de laminage à chaud et à froid. Figure tirée de la référence 124.

Il est aussi possible de recourir à la programmation génétique pour trouver la structure et les poids de réseaux de neurones artificiels présentant un bon compromis entre précision et complexité, en remplaçant les opérateurs arithmétiques par les fonctions trouvées dans les nœuds des réseaux. Jha

*et al.*⁴⁴ ont ainsi construit une approximation de la contrainte et du temps avant rupture par fluage de superalliages à base de nickel en fonction de leur composition. De façon similaire, Dimitriu *et al.*¹²⁶ ont modélisé la limite d'élasticité d'aciers ferritiques résistants au fluage. La performance de réseaux de neurones a également été comparée à celle des fonctions générées indépendamment par programmation génétique.⁴⁴

L'usage de la programmation génétique dans ce contexte demeure néanmoins comparativement limité par rapport aux réseaux de neurones artificiels « classiques », sans doute parce que le gain en matière de performances prédictives, dans le domaine de la métallurgie, ne semble pas clairement établi.

2.2.3 Régression par machine à vecteurs de support

La régression par machine à vecteurs de support (*Support Vector Regression machine*, SVR)¹²⁷ est une méthode de régression adaptée de l'algorithme de classification SVM (*Support Vector Machine*),¹²⁸ basé sur la théorie de l'apprentissage statistique.

Cette méthode consiste en la projection des observations expérimentales dans un espace secondaire dit « espace des caractéristiques » (*feature space*) ou « espace de redescription », dans lequel est opérée la régression. Cet espace peut être de dimension supérieure à l'espace primaire : les données sont parfois enrichies par l'intermédiaire de l'ajout de variables supplémentaires *a priori* pertinentes. Par exemple, si une régression doit relier la dureté d'un acier (sortie y) à sa teneur en carbone (variable v_1), la température du dernier traitement thermique (variable v_2) et le temps de refroidissement à l'air (variable v_3), l'espace primaire est de dimension trois ; un vecteur d'entrée peut être symbolisé par $\mathbf{x} = (v_1, v_2, v_3)$. Il paraît avantageux de compléter les données avec une variable supplémentaire, la vitesse de refroidissement v_4 , qui dépend des variables v_2 et v_3 : $v_4 \approx v_2/v_3$. L'espace des caractéristiques pertinentes à la régression devient ainsi de dimension quatre et un vecteur d'entrée devient $\mathbf{x}' = (v_1, v_2, v_3, v_4)$.

En supposant un ensemble de données $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n]$ dans l'espace primaire, le mappage entre les espaces primaire et secondaire est assuré par un ensemble de fonctions $\boldsymbol{\varphi}$ choisies de telle manière que la répartition des données dans l'espace secondaire soit linéaire et simplifie leur régression. De par l'écriture mathématique des SVR, l'interpolation d'une nouvelle valeur y_* pour un vecteur de paramètres \mathbf{x}_* inédit dépend uniquement des produits scalaires des vecteurs projetés $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)$,¹²⁸ dont la somme est pondérée par des poids α_i qui seront décrits ultérieurement :

$$y_* = \sum_{i=1}^n \alpha_i [\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i) \cdot \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_*)] \quad (2.5)$$

Dans la pratique, cette forme de régression est infaisable parce que la détermination explicite de l'ensemble de fonctions de mappage $\boldsymbol{\varphi}$ devient rapidement impossible¹²⁹ : en effet, le nombre de variables à calculer dans l'espace de redescription croît avec la dimension de \mathbf{x} et la complexité des fonctions utilisées dans l'expression des variables additionnelles (en particulier l'ordre des polynômes éventuellement employés).

La méthode des vecteurs de support propose le contournement de ce problème en ne considérant pas directement $\boldsymbol{\varphi}$ mais un « noyau » k (*kernel*) ressemblant à une fonction de covariance (voir section suivante sur les processus gaussiens). Cette fonction relie deux à deux les observations de l'espace de redescription, de telle façon que pour deux vecteurs d'entrée \mathbf{x}_1 et \mathbf{x}_2 :

$$\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_1) \cdot \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_2) = k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \quad (2.6)$$

Ainsi, seule la connaissance du noyau est requise pour l'interpolation, celui-ci gouvernant implicitement la projection des données d'entrées :

$$y_* = \sum_{i=1}^n \alpha_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_*) \quad (2.7)$$

Il s'agit de « l'astuce du noyau » (*kernel trick*). Cette forme est avantageuse car le noyau possède un nombre limité de paramètres comparé à l'ensemble des fonctions de mappage. Le noyau peut prendre différentes formes mathématiques tant que celles-ci respectent certaines conditions de faisabilité.¹²⁹ Entre autres, il est possible de recourir à des fonctions logistiques ou gaussiennes; un choix populaire est la fonction radiale de base :

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|^2}{r}\right) \quad (2.8)$$

Les poids α_i , ainsi que les paramètres de la fonction de covariance (tel r), sont ajustés pendant l'apprentissage. Celui-ci est guidé par la minimisation de l'erreur de généralisation et non par la minimisation de l'écart aux données mesurées¹²⁸; les modèles générés possèdent donc de bonnes propriétés prédictives.¹²⁹

La position des poids α_i permet de procéder à la détermination automatique de la pertinence de certains paramètres. Ces poids sont en dehors de la fonction de covariance et correspondent chacun à une ligne de la base de données. Durant l'apprentissage, l'algorithme peut juger certains points de cette base redondants et mettre les poids correspondants à zéro. Ceci réduit la taille du modèle final (dont la description ne nécessite pas la conservation des points redondants), lui conférant un aspect dit « économe » (*sparse*) et contrecarrant le surajustement.

Quelques travaux ont fait usage de machines à vecteurs de support pour la modélisation de propriétés physiques d'alliages métalliques. La SVR a notamment été utilisée pour déterminer les relations entre la dureté et la conductivité électrique d'alliages Al-Zn-Mg-Cu et Cu-Ni-Sn en fonction des paramètres de leurs traitements thermiques,¹³⁰⁻¹³² ou les relations entre les propriétés mécaniques d'aciers et d'alliages de titane et leur composition et leurs paramètres de traitements thermomécaniques.^{133,134}

L'un des principaux intérêts des SVR réside notamment dans la possibilité de simplifier les données grâce à l'approche économe. Ceci peut s'avérer utile dans le cas de très grandes bases de données, ce qui n'est pas le cas du présent travail. Par ailleurs, l'astuce du noyau confère aux SVR une structure mathématique cousine de celle des processus gaussiens, qui ont également été utilisés en métallurgie et dont le principe est décrit ci-après.

2.2.4 Processus gaussiens

En théorie des probabilités, une variable aléatoire réelle x suit une loi décrivant le résultat d'une expérience considérée comme aléatoire. La distribution normale (ou gaussienne) en est un cas particulier. Une variable aléatoire réelle x peut ainsi suivre une distribution normale définie par une moyenne μ et un écart-type σ (ou une variance σ^2) :

$$x \sim N(\mu, \sigma^2) \quad (2.9)$$

De manière plus générale, il est possible de définir une distribution normale sur une fonction (et pas seulement sur une variable), de telle façon que chaque point de cette fonction suit également

une distribution normale. Si \mathbf{X}_n est un sous-ensemble de l'espace, c'est-à-dire une matrice contenant n vecteurs d'entrées $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ de dimension $D \geq 1$, et $\mathbf{y} = (f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_n))$ un vecteur contenant les valeurs d'une fonction réelle f évaluée sur ce sous-ensemble, un processus de f , $P(f)$, est dit gaussien si $P(\mathbf{y})$ est une distribution gaussienne multidimensionnelle de dimension n , que l'on note alors $\mathcal{GP}(y)$.¹³⁵ Ainsi, pour un sous-ensemble à deux éléments \mathbf{x} et \mathbf{x}' , le processus gaussien de f est :

$$\mathcal{GP}(f(\mathbf{x}), f(\mathbf{x}')) \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{K})$$

Cette distribution gaussienne bidimensionnelle est définie par un vecteur de moyennes $\boldsymbol{\mu}$, dont les valeurs sont fonction des coordonnées \mathbf{x} des points dans l'espace d'entrée :

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{bmatrix} \mu(\mathbf{x}) \\ \mu(\mathbf{x}') \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

et par une matrice de covariance \mathbf{K} :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} k(\mathbf{x}, \mathbf{x}) & k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \\ k(\mathbf{x}', \mathbf{x}) & k(\mathbf{x}', \mathbf{x}') \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

où k est une fonction de covariance quantifiant l'intensité des corrélations entre \mathbf{x} et \mathbf{x}' . Plus généralement, pour un sous-ensemble à n éléments, $\boldsymbol{\mu}$ est un vecteur de dimension n et \mathbf{K} une matrice carrée de taille $n \times n$; c'est cette généralisation d'une distribution normale multidimensionnelle à l'échelle d'une fonction qui constitue un processus gaussien — ou « krigeage » en géostatistique.¹³⁶

Par exemple, la fonction $f(\mathbf{x})$ peut représenter l'évolution de la limite d'élasticité en fonction d'un vecteur composition \mathbf{x} . Seules des observations ponctuelles \mathbf{y}_n de cette fonction en n points $\mathbf{X}_n = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ sont généralement disponibles par l'intermédiaire de mesures expérimentales. Il est possible de résumer ces connaissances dans une distribution de probabilité multidimensionnelle $P(\mathbf{y}_n | \mathbf{X}_n)$: sachant les compositions \mathbf{X}_n , cette distribution indique la probabilité des valeurs \mathbf{y}_n de la limite d'élasticité. Si la fonction f est un processus gaussien, alors $P(\mathbf{y}_n | \mathbf{X}_n)$ est une distribution gaussienne multidimensionnelle.

Dans le cadre de la régression, il peut être intéressant de prédire une valeur précise de la fonction f , $y_{n+1} = f(\mathbf{x}_{n+1})$, pour une composition qui n'a pas été testée \mathbf{x}_{n+1} . La nouvelle distribution de probabilité combinée est alors $P(\mathbf{y}_n, y_{n+1} | \mathbf{X}_n, \mathbf{x}_{n+1})$: par rapport à la précédente distribution, seules les coordonnées du point auquel la prédiction doit être réalisée ont été rajoutées, la valeur de y_{n+1} étant inconnue puisqu'objet de la prédiction. Il s'agit encore, par définition d'un processus gaussien, d'une distribution normale multidimensionnelle. Étant donnée la connaissance des mesures expérimentales \mathbf{X}_n et \mathbf{y}_n et du nouveau vecteur d'entrée \mathbf{x}_{n+1} , il est alors possible de déterminer la distribution de probabilité unidimensionnelle sur la prédiction y_{n+1} ¹³⁷ :

$$P(y_{n+1} | \mathbf{X}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_{n+1}) = \frac{P(\mathbf{y}_n, y_{n+1} | \mathbf{X}_n, \mathbf{x}_{n+1})}{P(\mathbf{y}_n | \mathbf{X}_n)} \quad (2.12)$$

Cette distribution, obtenue en divisant une distribution normale de dimension $n + 1$ par une autre de dimension n , est également normale et de dimension 1 :

$$P(y_{n+1} | \mathbf{X}_n, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_{n+1}) \sim N(y_*, \sigma_*^2) \quad (2.13)$$

Cette distribution est définie par une moyenne y_* :

$$y_* = \mathbf{k}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{y} \quad (2.14)$$

et une variance :

$$\sigma_*^2 = \mathbf{k}_* - \mathbf{k}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{k}^T \quad (2.15)$$

Sous réserve de la connaissance de \mathbf{k}_* , \mathbf{k} et \mathbf{K} qui seront définis ci-dessous, la moyenne y_* est ainsi la valeur la plus probable de la variable y pour les coordonnées \mathbf{x}_{n+1} . Étant donné que la variable y est la grandeur modélisée, y_* est la prédiction à réaliser. De la même manière, σ_* est l'écart-type de la distribution de y pour les coordonnées \mathbf{x}_{n+1} ; il donne une indication de l'incertitude de la prédiction sous la forme d'une « barre d'erreur ».

\mathbf{K} est une matrice de covariance dont les termes sont calculés à partir d'une fonction de covariance k et des données :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & \cdots & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & \cdots & k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_n) \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

\mathbf{K} exprime la manière dont chaque point de la base de données, de coordonnées d'entrée \mathbf{x}_i , peut être corrélé à tout autre point de coordonnées \mathbf{x}_j , *via* une fonction de covariance. Par ailleurs, $\mathbf{k} = [k(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{x}_1), \dots, k(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{x}_n)]$ représente la covariance entre le point pour lequel une prédiction est effectuée, de coordonnées d'entrée \mathbf{x}_{n+1} , et tout point de la base de données de coordonnées \mathbf{x}_i .

La fonction de covariance quantifie l'influence des variables d'entrée sur la fonction modélisée et est un élément critique des processus gaussiens. Il existe une variété de fonctions de covariance,¹³⁸ pouvant incorporer plus ou moins d'informations sur l'évolution attendue des données.¹³⁹ Dans le cadre de ce travail, les connaissances sur les propriétés modélisées ne sont pas suffisantes pour permettre la personnalisation de cette fonction comme dans le travail de Duvenaud.¹³⁹ Une fonction de covariance communément employée, connue pour ses capacités de régression et de prédiction généralement correctes, est ainsi employée : la fonction gaussienne ou « exponentielle du quadratique¹³⁹ », de la forme :

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \alpha_1 \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{d=1}^D \left(\frac{x_d - x'_d}{l_d} \right)^2 \right] + \alpha_2 \delta_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} + \alpha_3 \quad (2.17)$$

où :

- α_1 , α_2 et α_3 sont des paramètres dépendant des données;
- x_d , $1 \leq d \leq D$ la valeur de la coordonnée du vecteur \mathbf{x} dans la dimension d ;
- l_d le facteur d'échelle dans la dimension d ;
- δ le symbole de Kronecker : $\delta_{ij} = 1$ si $i = j$, 0 autrement.

De par sa forme, cette fonction implique que les données proches dans l'espace d'entrée (par exemple des alliages de composition similaire) prennent des valeurs proches dans l'espace de sortie (des propriétés similaires). Inversement, plus les points sont éloignés et plus la valeur de la fonction de covariance diminue. Autrement dit, plus les coordonnées d'entrée de deux points sont éloignées, moins ces points ont d'influence l'un sur l'autre. En termes de régression, cette supposition est raisonnable : une nouvelle valeur devant être prédite par interpolation dépend plus fortement des points immédiatement alentour, plutôt que des observations distantes.

Les facteurs d'échelle pondèrent cet effet de distance. Plus un facteur d'échelle est élevé et plus la variation de distance dans la dimension correspondante devra être grande pour influencer la valeur de la fonction de covariance. Chaque facteur peut ainsi servir d'indicateur de pertinence : si la sortie est peu affectée par une certaine variable d'entrée, cette dernière peut être raisonnablement « ignorée »; l'algorithme d'apprentissage devrait alors associer une valeur élevée de l_d à cette variable d'entrée, lui interdisant mathématiquement d'influencer notablement la variable de sortie.

Cet indicateur est utile pour déterminer l'importance des paramètres lors de la modélisation de phénomènes physiques.

Les paramètres de la fonction de covariance α_1 , α_2 et α_3 et les l_d sont ajustés lors de l'étape d'apprentissage du modèle par maximisation de la vraisemblance (*likelihood*)¹³⁸ de manière à conduire à la meilleure adéquation du modèle avec les données. Ces paramètres sont également dénommés « hyperparamètres » car ils ne conditionnent pas explicitement la forme de l'interpolant, contrairement aux poids des réseaux de neurones par exemple.

La possibilité d'utiliser des processus gaussiens pour la modélisation de propriétés d'alliages en fonction de leur composition a été démontrée par Bailer-Jones *et al.*⁵ sur les températures de début et de fin de transformation austénitique d'aciers, et Tancret *et al.*¹⁴⁰ sur la limite d'élasticité de superalliages à base de nickel. Ce dernier travail comprend en outre une comparaison avec des réseaux de neurones artificiels précédemment établis par Jones & MacKay⁴ et entraînés sur la même base de données (figure 2.13).

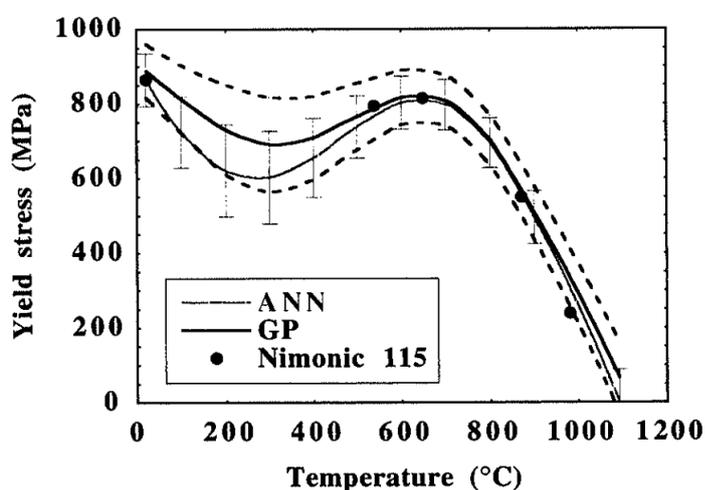


Figure 2.13 — Évolution de la limite d'élasticité d'un superalliage à base de nickel en fonction de la température, telle que prédite par des réseaux de neurones (trait fin associé aux barres d'erreur) et des processus gaussiens (trait gras) dont l'écart-type est représenté en pointillés. Les points représentent les mesures expérimentales. Les deux modèles ont été entraînés sur la même base de données. Figure tirée de la référence 140.

Par ailleurs, les prédictions issues de processus gaussiens des propriétés mécaniques en traction (résistance à la traction, limite d'élasticité) et en fluage (contrainte de rupture) en fonction de la composition nominale et de la température ont notamment servi de base à l'optimisation de la chimie de superalliages destinés à des centrales thermiques de dernière génération.^{15,30,37} Certaines de ces prédictions ont été confirmées expérimentalement.^{77,141}

Les processus gaussiens sont utilisés dans cette étude dans la continuité de ces derniers travaux. Les paragraphes suivants présentent quelques arguments qui ont conduit à ce choix.

Les processus gaussiens intègrent par défaut le traitement bayésien de l'apprentissage des paramètres de la régression, ce qui garantit un usage aisé et de bonnes propriétés de généralisation, c'est-à-dire de bonnes capacités de prédiction en dehors des données observées tout en évitant le surapprentissage dans le cas de données « bruitées »¹²².

Par ailleurs, d'un point de vue mathématique, les processus gaussiens sont équivalents à des perceptrons multicouches avec un nombre infini de nœuds cachés.¹⁴² Ainsi, ils n'imposent pas d'a

priori irrévocable sur la forme de la fonction à modéliser : il s'agit d'une méthode de régression non paramétrique (puisqu'elle est « hyperparamétrique ») ne résultant pas en une forme fermée — c'est-à-dire une expression mathématique complète — de la fonction approximée (par exemple l'évolution de la limite d'élasticité en fonction de la composition et de la température). Ils sont capables d'adapter automatiquement la complexité de l'interpolant aux tendances implicitement contenues dans les données avec une structure et une fonction de covariance uniques, sans avoir à gérer cette complexité lors de l'apprentissage, contrairement aux réseaux de neurones artificiels. Cet aspect confère aux processus gaussiens une plus grande flexibilité que ces derniers, qui imposent en effet de faire plus de choix sur la fonction d'approximation lors de la sélection du nombre de nœuds cachés. Comparés à la programmation génétique, les processus gaussiens sont plus simples à utiliser car ils nécessitent moins de paramétrage (comme le choix des opérateurs arithmétiques). La programmation génétique impose également la définition, parfois délicate, des paramètres et des opérateurs de l'algorithme génétique sous-jacent.

Contrairement aux réseaux de neurones non bayésiens, à la programmation génétique et aux machines à vecteurs de support, les prédictions issues des processus gaussiens sont probabilistes et suivent une loi normale définie par une moyenne et un écart-type, interprétables comme une estimation nominale et son erreur. Cette erreur renseigne sur l'incertitude du modèle en certains domaines de l'espace ; elle est utile pour guider la recherche d'alliages performants dans les limites des connaissances extraites de la base de données expérimentales, en signalant notamment toute extrapolation extrême.

L'opération de prédiction des processus gaussiens dépend de l'inversion d'une matrice de covariance de taille identique au nombre de données d'apprentissage. Cependant, cet inconvénient est mineur : cette matrice n'est pas à recalculer pour chaque nouvelle estimation ; seuls le vecteur \mathbf{k} et le scalaire k_* doivent être déterminés. Une fois les paramètres de la fonction de covariance trouvés, la matrice de covariance peut être conservée en mémoire sous sa forme inversée. Ne nécessitant que des calculs d'algèbre linéaire, toute nouvelle prédiction ne prend que quelques dizaines de millisecondes au plus.

De manière similaire à la régression par processus gaussiens, la régression par machines à vecteurs de support est basée sur l'emploi d'un noyau (ou fonction de covariance). Celle-ci partage ainsi certains avantages des processus gaussiens face aux réseaux de neurones ou à la programmation génétique. Cependant, l'un des principaux intérêts de la régression par machines à vecteurs de support réside dans une représentation « économe » de l'interpolant ; celle-ci est superflue pour l'application visée ici, qui implique l'apprentissage de modèles fixes sur de petites bases de données (contenant moins de 2000 données comme il sera vu plus tard). Les temps d'apprentissage restent, dans ce cas, raisonnables et sont de l'ordre d'une heure.

Les processus gaussiens semblent donc constituer ici un meilleur compromis entre rapidité de calcul, fiabilité des prédictions et facilité d'utilisation. Dans ce travail, la bibliothèque NETLAB,¹⁴³ disponible sous forme de « boîte à outils » pour MATLAB,¹⁴⁴ est utilisée pour créer les modèles.

2.2.5 Synthèse

Pour être viable, la conception d'alliages assistée par ordinateur nécessite des outils permettant d'estimer rapidement leur performance. Les principaux modèles théoriques de métallurgie physique permettent de décrire partiellement des propriétés en fonction d'un nombre réduit de paramètres ou sur des gammes de composition limitées. Inversement, la modélisation complète

des propriétés d'un alliage suppose la prise en compte de nombreuses interactions multidimensionnelles, une tâche particulièrement complexe à effectuer « à la main ». L'utilisation de techniques mathématiques permet de contourner ce problème, en sous-traitant l'expression des interdépendances paramètres-propriétés à l'outil informatique. En particulier, les méthodes de fouille de données offrent la possibilité de modéliser les propriétés d'alliages de façon quasiment automatique, l'intervention humaine y étant minimisée. Moyennant quelques précautions mathématiques, les modèles générés encodent adéquatement les tendances dissimulées dans les données et permettent la prédiction de propriétés pour des jeux de paramètres inédits, tout en fournissant une incertitude sur la prédiction dans le cas d'outils statistiques. Ces prédictions sont rapidement calculables, ce qui permet l'intégration de ces outils aux côtés de la thermodynamique prédictive dans des routines d'optimisation.

De manière similaire aux modèles théoriques, les algorithmes de fouille de données peuvent décrire « localement » l'évolution de propriétés. Cependant, les gammes de paramètres d'entrée sont limitées, non pas par la volonté de simplifier la théorisation, mais par le nombre de données expérimentales disponibles et par la capacité de calcul des méthodes informatiques. Ces deux difficultés sont solubles par l'utilisation du corpus de données relatives à toute une catégorie d'alliages, disponibles dans la littérature technique et scientifique, et par le recours à une technique de régression adaptée tels les processus gaussiens.

Ainsi, les processus gaussiens serviront dans ce travail à estimer plusieurs propriétés mécaniques de superalliages à base de nickel en fonction de leur composition nominale et de la température :

- la résistance à la traction R_m ;
- la limite d'élasticité R_e ;
- la contrainte à la rupture par fluage CRF, c'est-à-dire la contrainte initiale nécessaire à la rupture par fluage du matériau pour un temps et une température donnés.

La prédiction du paramètre de maille des phases γ et γ' (respectivement a_γ et $a_{\gamma'}$) sera aussi réalisée en fonction de leur composition et de la température de manière à estimer le désaccord paramétrique δ entre ces deux phases.

Dans le cadre de la conception d'alliages à forte entropie, les processus gaussiens seront employés en complément de plusieurs critères physicochimiques et thermodynamiques pour juger de la susceptibilité d'un alliage multicomposants à adopter une constitution monophasée.

Le détail de ces différents modèles et des bases de données associées sera exposé dans les chapitres d'application respectifs.

2.3 Algorithmes génétiques et analyse décisionnelle pour l'optimisation multiobjectifs

Un alliage est constitué d'un ensemble d'éléments d'addition dont la combinaison permet l'obtention de caractéristiques supérieures à celles des éléments considérés individuellement. Avec les traitements thermomécaniques, ces éléments façonnent la microstructure et conditionnent les propriétés macroscopiques telles les résistances mécanique et chimique. Concevoir des alliages performants implique donc dans un premier temps de choisir la nature des éléments d'addition, d'en fixer la teneur puis de déterminer les paramètres des traitements thermiques résultant en une microstructure conduisant aux propriétés désirées.

De manière générale, la nature et la proportion des éléments sont choisies sur la base de l'adéquation entre les phases dont ceux-ci promeuvent la formation, les propriétés escomptées et les applications visées. Les éléments sont ainsi sélectionnés de façon à ce que leur arrangement avec les autres espèces soit bénéfique aux propriétés macroscopiques. La thermodynamique prédictive et la fouille de données peuvent permettre d'affiner ces choix en quantifiant l'influence des différents composants.

Cependant, ces outils permettent seulement de déterminer certaines caractéristiques d'un alliage en fonction de sa composition et ne permettent pas directement d'inférer les compositions conduisant aux propriétés désirées. La résolution de ce problème de « conception inverse⁴⁰ » implique d'explorer le domaine des compositions possibles afin d'identifier et d'isoler les plus prometteuses. En pratique, il s'agit d'un problème d'optimisation combinatoire qui consiste à trouver une combinaison adéquate de teneurs en éléments d'addition. Guidée par la thermodynamique prédictive et/ou la fouille de données, la recherche peut être conduite « manuellement » ou systématisée par l'emploi de plans d'expériences. Comme illustrées dans les sections précédentes, de telles approches ont déjà permis la conception d'alliages innovants. Une exploration systématique de l'espace de composition est possible à l'aide d'une interface de programmation,⁶⁴ en prédisant les propriétés de tous les alliages situés sur une grille contenant N points :

$$N = \prod_{a=1}^A N_a \quad (2.18)$$

où A est le nombre d'éléments d'alliage et N_a le nombre de niveaux de concentration pour l'élément a. Ces approches ne sont néanmoins applicables que pour des gammes de compositions restreintes. En effet, comme l'indique l'équation ci-dessus, le domaine des compositions à explorer croît avec le nombre d'éléments d'addition et les étendues de leur teneur : par exemple, les superalliages à base de nickel contiennent communément une dizaine de composants, dont la grande solubilité dans le nickel permet d'ajouter une quantité importante (jusqu'à plus de cinquante pourcents massiques). Un domaine gigantesque de compositions possibles est ainsi aisément délimité. En considérant douze éléments d'addition et cinquante niveaux possibles pour chaque élément, le nombre d'alliages productibles s'élève à $50^{12} \approx 2,4 \times 10^{20}$; si l'estimation des propriétés prend 20 ms par composition, le temps nécessaire à la vérification de tous les alliages attendrait 155 milliards d'années, soit un ordre de grandeur de plus que l'âge de l'Univers. La taille titanesque de ces espaces de recherche proscrit donc leur exploration « manuelle » ou systématique, même avec les méthodes de prédiction rapides détaillées précédemment.

Afin de concevoir des alliages en un temps raisonnable, il est donc nécessaire de recourir à des méthodes de recherche non exhaustives telles les métaheuristiques, qui permettent l'exploration « intelligente » d'un domaine (à l'opposé des plans d'expériences systématiques « naïfs »). Les métaheuristiques sont des algorithmes de recherche (heuristique) généralistes (méta-), applicables à de

nombreux types de problèmes d'optimisation. Ces algorithmes procèdent à une exploration progressive de l'espace des possibles selon des plans d'expériences « dynamiques » dont la progression dépend des points précédemment explorés. Dans le cadre de cette étude, l'espace de compositions est parcouru itérativement, les alliages testés à chaque étape dépendant de la performance des alliages précédemment vérifiés à l'aide des outils prédictifs. Cette recherche est par définition incomplète : toutes les solutions de l'espace ne sont pas contrôlées. À la place, ces algorithmes se spécialisent dans la découverte de solutions particulières : les solutions potentiellement optimales.

Dans le cadre de la conception d'alliages, les algorithmes génétiques constituent une des méta-heuristiques les plus employées pour la recherche de compositions ou de traitements thermiques conduisant à des propriétés quasi-optimales. Le fonctionnement et les usages de cette méthode sont détaillés dans les sections suivantes.

2.3.1 Algorithmes génétiques : généralités

Les algorithmes génétiques^{145,146} appartiennent à une catégorie de métaheuristiques dite « évolutionnaire ». Cette catégorie tire son nom de leur principale source d'inspiration : l'évolution biologique. L'évolution est un processus ayant conduit, au fil du temps, à l'engendrement d'espèces adaptées à leur environnement. L'idée derrière les métaheuristiques évolutionnaires est de reproduire artificiellement les mécanismes ayant conduit à cette adaptation. Plus particulièrement, les métaheuristiques évolutionnaires cherchent à émuler certains des processus décrits par la théorie de la sélection naturelle de Darwin,¹⁴⁷ selon laquelle l'adaptation d'une espèce est assurée par la transmission de caractères favorables de parents à enfants, les premiers ayant réussi à survivre dans un environnement compétitif et donc passé ladite sélection.

La résolution de problèmes d'optimisation par l'intermédiaire de l'émulation de l'évolution implique le recours à des « individus » qui représentent des solutions à ces problèmes. Ces individus sont membres de l'espace de recherche ; ce sont typiquement des vecteurs symbolisant la composition d'alliages. Un ensemble d'individus est appelé « population » ; constituant un sous-ensemble de l'espace de recherche, c'est la quantité motrice des algorithmes génétiques. Chaque individu possède sa propre « aptitude » ou « valeur adaptative » (*fitness*) dépendante des performances de l'individu par rapport au reste de la population, qui est par exemple jugée sur la base de ses propriétés mécaniques prédites. La population évolue durant plusieurs « générations » au cours desquelles les individus subissent des variations induites par des opérateurs génétiques qui simulent les phénomènes de reproduction et de mutation modifiant la valeur des « gènes » des individus. L'ensemble des gènes d'un individu forme son « génotype » ; si les individus représentent des alliages, alors les gènes pourraient être les éléments d'addition les constituant. À chaque génération, les individus subissent une « sélection naturelle » inspirée de la « survie du plus fort » de Darwin : les individus les plus performants sont conservés tandis que les autres sont rejetés. La répétition de cette sélection génération après génération conduit à l'amélioration progressive de la performance des individus de la population par le biais de la bonification de leur génotype.

De façon générale, un algorithme génétique procède à l'évolution de la population selon les étapes suivantes :

1. initialisation d'une population de départ ;
2. sélection d'une partie de la population qui sert de « parents » ;
3. reproduction des parents sélectionnés et génération « d'enfants » ;
4. mutation d'une partie des enfants ;
5. évaluation de la valeur adaptative de chaque individu ;

6. sélection des meilleurs individus qui remplacent une partie de la population précédente.

Les étapes 2 à 6 sont effectuées de manière itérative jusqu'à ce qu'une condition de terminaison soit remplie (nombre de générations maximal, seuil de valeur adaptative individuelle, etc.). Les paragraphes suivants détaillent plus amplement les opérations génétiques qui conduisent à l'optimisation.

Initialisation Avant d'engager le processus itératif, la population est initialisée individu par individu. Chacun est constitué de gènes dont la valeur est générée aléatoirement dans l'espace de recherche. La procédure d'initialisation s'arrête lorsque le nombre d'individus créés atteint un maximum prédéfini.

Sélection La sélection consiste à isoler un sous-ensemble de la population dont les membres serviront de parents au cours de l'opération de reproduction ultérieure. La sélection privilégie les individus performants de la population de façon à augmenter les chances de transmettre de « bons » gènes aux futurs enfants. Les individus faibles sont pénalisés par leur valeur adaptative déterminée au cours de l'étape d'évaluation : ils sont moins susceptibles d'être sélectionnés pour participer à la reproduction et tendent donc à « disparaître ».

Reproduction (ou croisement) De manière similaire à l'évolution naturelle, la reproduction implique deux parents issus de la sous-population créée à l'étape précédente. La reproduction consiste généralement en une hybridation des parents de manière à générer un ou plusieurs enfants constitués d'une partie de leur matériel génétique. Étant donné que les parents ont passé la sélection naturelle, leurs gènes sont considérés « adaptés » ; leur mélange est ainsi supposé conférer, au moins à certains enfants, des performances similaires ou supérieures à celles des parents. Dans le cadre de l'optimisation, le partage d'une partie des gènes revient à explorer un domaine de l'espace plus ou moins proche des parents. La recherche est ainsi itérative : les individus testés à la génération suivante (les enfants) sont déterminés dynamiquement en fonction des individus précédemment vérifiés (les parents). La proportion de gènes « échangés » dépend d'un paramétrage de l'algorithme génétique.

Mutation La mutation permet de maintenir la diversité de la population par l'intermédiaire de modifications aléatoires du génome de certains enfants. La mutation contrecarre la tendance élitiste des algorithmes génétiques qui, après avoir appliqué une sélection répétée pendant plusieurs générations des meilleurs individus, préfère générer des individus au génome similaire (phénomène désigné *genetic drift*, déviation génétique). Sans mutation, la population tend à se remplir de membres d'une même famille, ce qui freine l'exploration correcte de l'espace en empêchant son échantillonnage. La déviation génétique conduit généralement l'algorithme vers un optimum dit « local ». En effet, la population étant emplie d'élites cousines dont l'algorithme génétique se satisfait, la reproduction ne peut engendrer d'individus nouveaux et la recherche est bloquée. La mutation provoque l'insertion de « sang neuf » en faisant varier arbitrairement la valeur de gènes de certains individus. Si la reproduction permet d'exploiter le matériel génétique des parents afin d'explorer un domaine « proche » de ceux-ci, la mutation permet au contraire de s'en éloigner et de se déplacer dans l'espace de recherche en générant des individus aux gènes significativement différents. Les individus « mutants » rendent ensuite possible, par reproduction avec les membres inchangés de la population, la reprise de l'optimisation.

Évaluation La valeur adaptative des enfants générés par reproduction et mutation est ensuite évaluée. À chaque individu correspond un « degré de performance » (*figure of merit*) calculé par

une fonction dépendante de l'application. Dans le cadre de ce travail, cette évaluation est basée sur la thermodynamique prédictive et les processus gaussiens qui permettent d'associer le mérite (ou valeur adaptative) d'un alliage à ses propriétés. Une fois évaluée, cette valeur sert au classement des individus.

Remplacement Après la sélection des parents, l'opération de remplacement constitue la deuxième étape de la sélection naturelle dans un algorithme génétique. Si des enfants engendrés au cours de la génération surpassent certains parents, les premiers sont admis dans la population de la génération suivante tandis que les derniers en sont rejetés (ils sont artificiellement « mis à mort »). L'algorithme génétique reprend alors les mêmes opérations à la génération suivante.

Les algorithmes génétiques ont été largement employés dans le domaine des sciences des matériaux,¹⁴⁸ par exemple pour la conception d'alliages métalliques, de matériaux polymères, de matériaux composites et de revêtements, ainsi que pour le paramétrage de procédés de soudage.

2.3.2 Les algorithmes génétiques pour la conception d'alliages

L'application des algorithmes génétiques à la conception d'alliages est directe : un alliage peut être vu comme un individu dont les gènes sont les paramètres constitutifs de l'alliage (éléments d'addition, paramètres de traitements thermomécaniques, constitution, etc.) et dont la valeur adaptative est estimée à partir de ses caractéristiques (thermodynamiques, thermomécaniques, etc.). La recherche d'alliage aux propriétés optimales se fait ainsi par échange (reproduction) et variation (mutation) de ces paramètres constitutifs et sélection systématique des alliages possédant les meilleures propriétés (vis-à-vis de critères définis par l'utilisateur). En encodant ainsi le problème de conception, les algorithmes génétiques sont en mesure d'optimiser ces paramètres pour des alliages de n'importe quelle famille, moyennant adaptation de la représentation génotypique. Cette flexibilité justifie en partie leur dénomination de *métaheuristique*.

Les algorithmes génétiques sont en mesure de traiter des problèmes de deux types : les problèmes d'optimisation mono- et multiobjectifs. Dans le premier cas, l'optimisation n'est conduite qu'en fonction d'une seule grandeur à minimiser (par exemple le coût) ou à maximiser (la résistance en traction).

Le travail de Mahfouf²⁷ est un des premiers dans lequel un algorithme génétique est exploité pour l'optimisation d'une seule propriété en ajustant la teneur en éléments d'addition et la température de traitement thermique d'aciers. L'optimisation est conduite dans le but d'atteindre des valeurs prédéfinies soit de résistance maximale en traction, soit de taux de striction.

Cependant, la conception d'alliages ne se base généralement pas sur des critères unidimensionnels ; au contraire, celle-ci consiste généralement en l'amélioration simultanée de plusieurs propriétés et la recherche de compromis. En effet, ces propriétés sont souvent incompatibles, l'amélioration d'une propriété se faisant souvent au prix de la dégradation d'une autre ; c'est par exemple le cas de la résistance mécanique en traction et de la ductilité. La recherche des variables constitutives optimales est donc, comme beaucoup de problèmes réels, une instance d'optimisation multiobjectifs dont la résolution nécessite des compromis.

Il existe plusieurs façons de résoudre ce problème multiobjectifs. La première consiste à le rapporter à une optimisation mono-objectif en agrégeant les objectifs en un seul scalaire, qui devient alors l'unique critère d'optimisation. L'agrégation peut notamment se faire sous la forme d'une fonction pondérée de la valeur de chaque caractéristique d'un alliage (*scalarizing function*).

La maximisation de plusieurs propriétés mécaniques en traction (résistance et allongement à la rupture) agrégées en un seul critère a ainsi fait l'objet de recherches dans le cas d'aciers^{29,35} ou d'alliages de titane.³⁴ La prise en compte du coût est notamment possible en optimisant un ratio propriété sur coût.¹⁴⁹ Couplé à des réseaux de neurones, un algorithme génétique a permis à Joo *et al.* d'identifier des compositions d'alliages dont les propriétés sont supérieures à un seuil prédéfini.⁹⁷

La conception de superalliages à base de nickel forgeables et soudables a aussi été conduite en minimisant la proportion de la phase durcissante γ' , tout en interdisant la présence de phases délétères pour s'assurer de la stabilité de la microstructure.³⁷ Dans une autre étude, un ratio résistance au fluage sur coût a servi de base à l'optimisation de superalliages identiquement contraints.³⁰ Les alliages ne respectant pas les contraintes se voient assigner une pénalité numérique à leur valeur adaptative qui conduit à leur rejet.

L'optimisation mono-objectif de la composition et des paramètres de traitements thermomécaniques d'aciers ferrito-martensitiques ou austénitiques résistants au fluage a également largement été discutée.^{28,36,65-67,69-72} Dans ces travaux, l'optimisation porte sur la maximisation du nombre de précipités par unité de volume ou du renforcement par solution solide ou par précipitation. Cet objectif est calculé seulement pour les alliages respectant une série de contraintes de constitution concernant les températures de transformation martensitique ou austénitique, le volume total des phases indésirables et la quantité de chrome dans la matrice. L'optimisation est donc implicitement multiobjectifs, les propriétés mécaniques n'étant maximisées que pour les alliages dont la constitution est jugée adaptée.

À l'aide d'un algorithme génétique, Chatterjee *et al.*¹¹⁷ ont optimisé la composition d'aciers TRIP en maximisant la proportion d'austénite résiduelle, prédite par un réseau de neurones artificiels, en ajustant les additions de silicium dont les excès ont des effets esthétiques indésirables à la surface de ces aciers.

Enfin, Lu *et al.*³⁸ ont optimisé la composition d'aciers à faible activation neutronique vis-à-vis d'une seule propriété à la fois, l'analyse croisée des résultats des diverses optimisations menant à la détermination d'un compromis entre trois objectifs : l'activation neutronique, le renforcement par solution solide et le renforcement par précipitation.

Dans tous ces travaux, l'optimisation est faussement multiobjectifs puisque menée vis-à-vis d'un seul objectif mathématique (une seule variable scalaire à maximiser ou à minimiser); en conséquence, celle-ci ne peut permettre l'obtention que d'un extremum. En effet, il ne peut au final subsister qu'un seul « meilleur candidat » : celui présentant la valeur extrême du scalaire optimisé (le ratio résistance-ductilité le plus important par exemple). Ce scalaire défini arbitrairement simplifie les comparaisons entre alliages mais en dissimule les vraies propriétés : en réalité, une variété de compromis entre propriétés antagonistes existe. Si l'obtention de ces compromis requiert l'optimisation simultanée de plusieurs objectifs, comment comparer les alliages et établir la liste des meilleurs candidats?

La recherche vraiment multiobjectifs nécessite donc la définition du concept de compromis optimal. Une définition possible est l'optimalité au sens de Pareto, ou Pareto-optimalité.¹⁵⁰ Selon cette définition, une solution représente un compromis optimal s'il est impossible de l'améliorer dans une dimension sans la détériorer dans une autre. La figure 2.14, reprise du chapitre introductif, illustre schématiquement ce principe dans le cas où une propriété est maximisée et une autre minimisée. Sur cette figure sont représentés quelques dizaines d'alliages en fonction de leur coût et de leur résistance mécanique. Certains sont optimaux au sens de Pareto (disques) et d'autres non (cercles et alliage C). Par exemple, les alliages A et B sont optimaux : le passage de l'un à l'autre ne

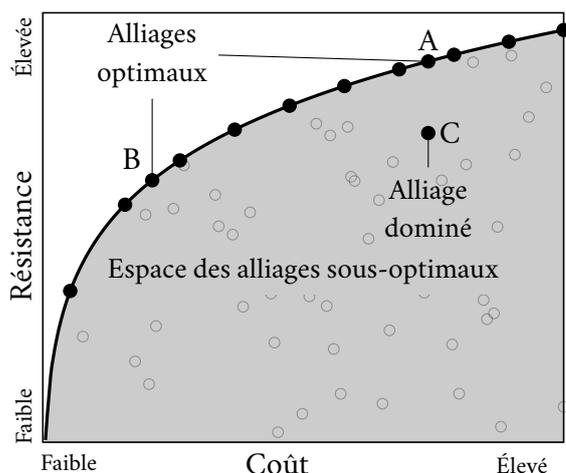


Figure 2.14 — Illustration du principe de la Pareto-optimalité. Les alliages A et B sont optimaux au sens de Pareto et représentent deux alternatives pertinentes. L'alliage C est sous-optimal par rapport à A et est dit dominé.

peut se faire qu'au détriment d'une des deux caractéristiques ; de A à B le coût diminue mais la résistance est amoindrie et inversement de B vers A. La courbe regroupant ces points optimaux est appelée « front de Pareto » et constitue la visualisation de « l'ensemble de Pareto » regroupant ces points. Les éléments de cet ensemble sont incomparables (mutuellement non « dominés »), chacun représentant un compromis ou une alternative légitime ; le choix d'un alliage est alors laissé au preneur de décision (*decision-maker*). Cet aspect sera évoqué ultérieurement dans cette section.

Comparé au point A, le point C est un compromis sous-optimal : en effet, le passage de C vers A se fait au bénéfice de la résistance et sans détérioration du prix. Ainsi l'alliage C, comme tous ceux situés sous le front de Pareto, est dit « dominé ».

La Pareto-optimalité conserve sa définition lorsque plus de deux objectifs sont considérés : un individu en domine un autre s'il possède au moins une meilleure caractéristique, tout autre caractéristique étant égale. Inversement, un individu n'est pas dominé par un autre si au moins une de ses caractéristiques est meilleure. À noter que cette définition est celle de la domination dite « faible » (*weak dominance*) ; la domination « forte » requiert le surpassement strict par un individu de tous les objectifs d'un autre.

Il est possible de recourir aux algorithmes génétiques dans le contexte de l'optimisation multi-objectifs¹⁵¹ ; leur rôle est alors de découvrir tout ou partie de l'ensemble de Pareto. C'est ainsi qu'ils ont servi à la recherche des teneurs en éléments d'alliages ou des temps et températures de traitements thermiques optimisant les propriétés mécaniques en traction d'aciers standards,^{39,41,105,152} d'aciers à faible taux d'éléments interstitiels⁹⁹ et d'aciers faiblement alliés.^{43,45} Ils ont également été employés pour l'optimisation d'alliages d'aluminium renforcés par précipitation^{46,100} et de superalliages à base de nickel.⁴⁴ Dans la plupart de ces travaux, les propriétés mécaniques, incluant la résistance en traction, la limite d'élasticité et l'allongement à la rupture, sont prédites par l'intermédiaire de réseaux de neurones, dont la structure est parfois elle-même optimisée à l'aide d'un algorithme génétique.^{43,44}

Exceptés Pattanayak *et al.*,⁴⁵ les auteurs des travaux sus-cités limitent l'optimisation à trois objectifs (un cas de figure souvent nommé *multi-objective* dans la littérature). En effet, la Pareto-optimalité

est source de complications pour un nombre plus élevé d'objectifs (*many-objective*, « maints-objectifs »), notamment en matière d'efficacité de la recherche des solutions optimales; ces complications seront discutées dans le premier chapitre applicatif ([chapitre 3](#)).

L'optimisation à maints objectifs est un domaine de recherche à part entière qui est actuellement en plein essor. La disponibilité « grand public » des algorithmes issus de ces recherches (et par extension l'exploitation et le retour d'expériences) est moindre que celle des algorithmes d'optimisation multiobjectifs. Afin de respecter les délais de la thèse, il a été choisi dans cette étude d'adapter un algorithme largement utilisé et « connu » plutôt que d'implémenter un nouvel algorithme « de zéro ». Il sera montré par la suite que cette approche multiobjectifs « adaptée » appliquée à des problèmes à maints objectifs, bien que théoriquement inférieure aux algorithmes dédiés à la résolution de ces derniers, procure des résultats très satisfaisants au regard des performances des alliages actuels. Autrement dit, la pertinence de la méthode proposée ici sera vérifiée par la pratique.

Enfin, les algorithmes génétiques ne sont pas les seules métaheuristiques employées pour l'optimisation de la composition d'alliages. D'autres méthodes existent, tels l'optimisation par essais particuliers,¹⁵³ la méthode des surfaces de réponse¹⁵⁴ ou le recuit simulé¹⁵⁵ et ont été utilisées par le passé.^{31,40,42,156} L'usage de techniques d'optimisation exacte a également été décrit.³² Les approches de ces travaux ressemblent à celles évoquées auparavant. Il est à noter qu'en tant que métaheuristiques, ces techniques, au même titre que les algorithmes génétiques, ne garantissent pas la découverte de solutions absolument optimales appartenant au vrai front de Pareto; en effet, la position de ce dernier est, comme dans beaucoup de problèmes réels, inconnue. Les solutions découvertes sont ainsi optimales vis-à-vis de l'espace exploré, celui-ci étant par définition incomplet. En d'autres termes, le type d'optimum (local ou global) vers lequel l'algorithme converge n'est pas clairement ni simplement définissable. Étant partagée par la plupart des métaheuristiques, cette limitation ne « disqualifie » (ni ne « qualifie plus ») les algorithmes génétiques par rapport aux autres techniques. Par souci de brièveté, ces dernières ne seront ainsi pas détaillées et les algorithmes génétiques, ayant fait leurs preuves, seront employés.

La littérature regorge d'algorithmes génétiques dédiés à la résolution de problèmes multiobjectifs; il est ici fait usage de la deuxième version de « l'algorithme génétique de tri de non-domination », simple à utiliser car nécessitant peu de paramétrage.

2.3.3 L'algorithme génétique de tri de non-domination

La seconde version de l'algorithme génétique de tri de non-domination (*Non-dominated Sorting Genetic Algorithm*, NSGA-II) est choisie comme la base de l'algorithme d'optimisation. Il s'agit d'un des algorithmes génétiques multiobjectifs les plus populaires : l'article l'introduisant¹⁵⁷ a été cité plus de 8000 fois. Il est ici fait usage de l'implémentation C++ disponible dans la bibliothèque ParadisEO.¹⁵⁸

NSGA-II reprend dans les grandes lignes le fonctionnement de l'algorithme génétique décrit précédemment (cf. [sous-section 2.3.1](#)). Cet algorithme optimise itérativement la population selon les étapes suivantes ([figure 2.15](#)) :

1. Initialisation de la première population : un ensemble P_t de N parents est généré aléatoirement;
2. Transformation (reproduction et mutation) : certains parents sont sélectionnés pour se reproduire et créer une population Q_t de N enfants dont certains subissent ensuite des mutations;

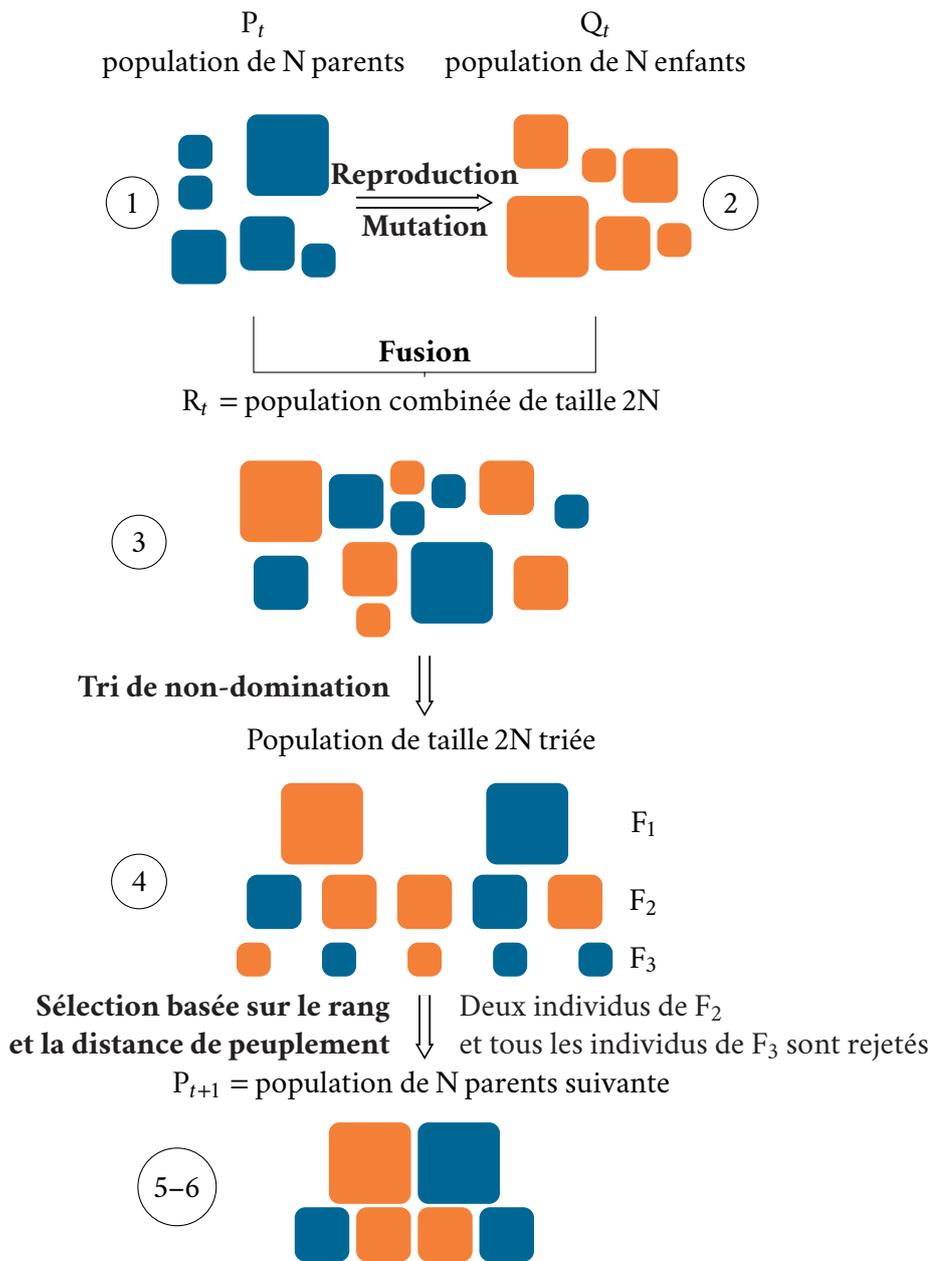
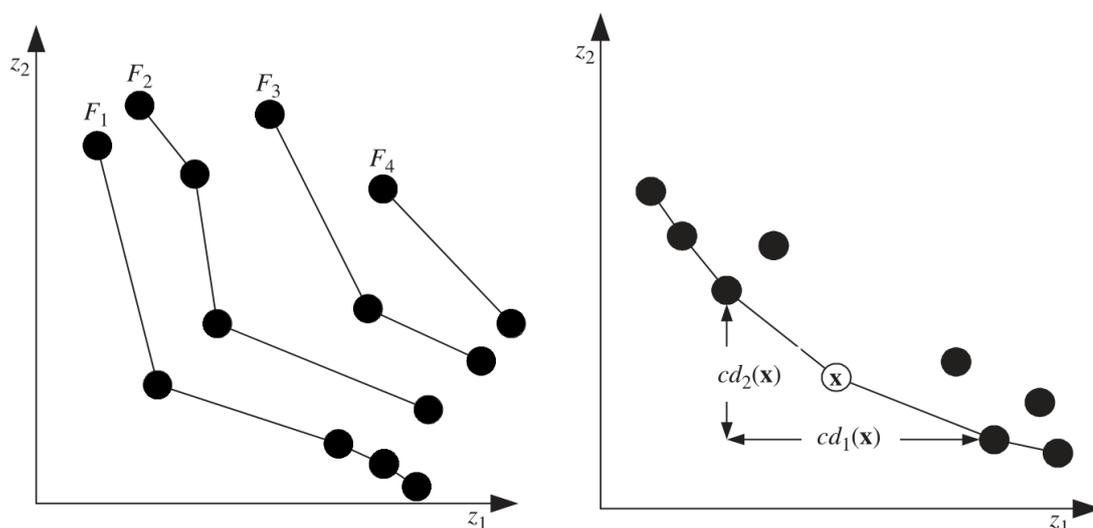


Figure 2.15 — Fonctionnement schématique de NSGA-II pendant une génération. Les populations P_t et Q_t contiennent ici $N = 6$ individus symbolisés par des carrés dont la taille est proportionnelle à leur valeur adaptative. Schéma adapté d'une figure provenant de la référence 159.

3. Fusion des populations : les populations d'enfants et de parents sont fusionnées pour obtenir une population combinée $R_t = P_t \cup Q_t$ de taille $2N$;
4. Classement : la population R_t est ordonnée *via* un tri de non-dominance qui subdivise la population en fronts F_i . Le front $i + 1$ est composé de tous les individus qui deviennent Pareto-optimaux lorsque le front i est retiré de la population (figure 2.16(a)). Plus l'indice du front i est élevé et moins la valeur adaptative de ses membres est bonne;
5. Remplacement (1) : les individus appartenant aux premiers fronts sont placés *de facto* dans la population de la génération suivante P_{t+1} tant que leur nombre ne dépasse pas la taille de la population N . Parce que des individus faisant partie des meilleurs sont d'emblée admis dans la population de la génération suivante, l'algorithme est dit « élitiste »;

6. Remplacement (2) : les individus du premier front dont tous les membres ne peuvent être placés dans la population de la génération suivante sont classés une seconde fois, cette fois-ci selon la distance de peuplement (*crowding distance*). Cette distance traduit la densité d'occupation de la zone de l'espace dans laquelle un individu se trouve, c'est-à-dire la proximité d'un individu avec ses voisins immédiats (figure 2.16(b)). Cette distance est généralement calculée dans l'espace des objectifs à partir de la distance de Manhattan (en référence à la distance parcourue par un véhicule circulant dans une ville aux rues perpendiculaires). Afin de privilégier des compromis divers (par exemple différents couples propriété-coût), les individus éloignés de leurs voisins sont favorisés et sont autorisés à rentrer dans la population de la génération suivante. Les individus restants sont rejetés.
7. La procédure reboucle à l'étape 2 si la condition de terminaison n'est pas remplie.



(a) Illustration du tri de non-dominance. Les axes symbolisent deux objectifs à minimiser et les disques noirs représentent des individus. Le tri de non-dominance sépare les individus selon leurs interrelations de dominance : les individus du premier front F_1 ne sont dominés par aucun autre ; les individus du second front F_2 sont dominés par ceux du premier, etc.

(b) Illustration du calcul de la distance de peuplement. Pour un individu x , cette distance dépend des écarts cd_1 et cd_2 dans les deux dimensions de l'espace des objectifs z_1 et z_2 entre les individus immédiatement à son voisinage et appartenant au même front (représenté par la ligne continue).

Figure 2.16 — Illustration de la répartition par front de non-dominance et du calcul de la distance de peuplement. Figures adaptées de la référence 160.

La sélection des parents est opérée par le biais d'un tournoi binaire qui consiste à tirer au sort deux individus parmi la population. Le vainqueur du tournoi (le futur parent) est l'individu de rang le plus faible (c'est-à-dire l'individu appartenant au front le plus proche du premier). Si le rang des deux individus est égal, celui présentant la distance de peuplement la plus grande est choisi ; dans le cas où rang et distance de peuplement sont identiques, le choix du parent est aléatoire. Ce tournoi est répété jusqu'à atteindre un nombre suffisant de parents.

Dans cette étude, le croisement binaire simulé (*Simulated Binary crossover*, SBX)^{161,162} est utilisé pour la reproduction. Cet opérateur est conçu pour des représentations génotypiques réelles et s'avère adapté pour traiter les problèmes dont il sera question dans les deux prochains chapitres. Il s'agit d'un opérateur de reproduction engendrant deux enfants dont le génotype est relativement proche

de ceux des parents (il est dit *parent-centric*); celui-ci favorise donc la recherche locale, d'où l'importance de la mutation. La distance entre parents et enfants est contrôlée par le paramètre η_c ; plus celui-ci est élevé et plus les enfants sont proches de leurs parents (figure 2.17).

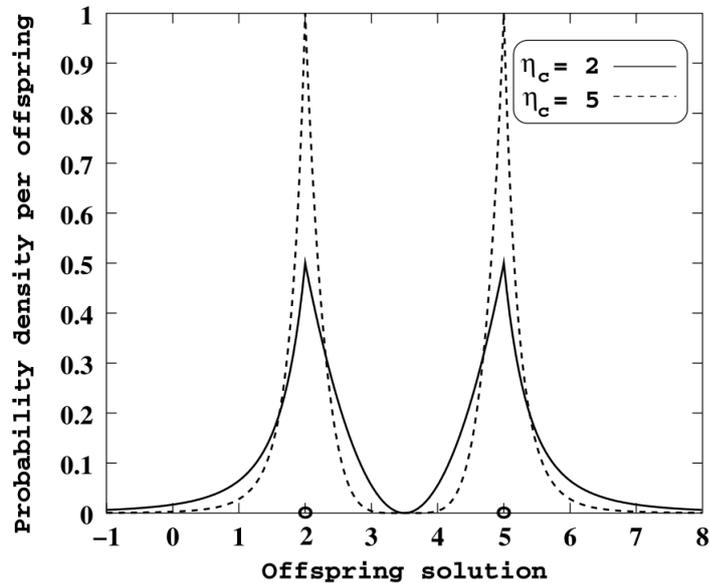


Figure 2.17 — Distribution de probabilité des enfants formés à partir de deux parents situés à $x = 2$ et $x = 5$.¹⁶³ Plus η_c augmente et plus la fonction de densité devient étroite, c'est-à-dire que les enfants générés sont susceptibles d'être proches de leurs parents.

La probabilité que deux individus sélectionnés par tournoi binaire deviennent effectivement des parents et engendrent des enfants est fixée dans ce travail à 70 %.

La mutation est conduite de manière uniforme et exhaustive : une nouvelle valeur comprise entre les bornes génotypiques est affectée à chaque gène de l'individu sélectionné pour mutation. Cette forme radicale de mutation est privilégiée pour faciliter l'exploration des larges espaces délimités lors de la conception d'alliages. La mutation est conduite avec une probabilité fixée à 0,1 tout au long de ce travail, c'est-à-dire qu'en moyenne 10 % des enfants créés subissent des mutations.

Dans le but d'améliorer la recherche, une « archive » est adjointe à l'algorithme NSGA-II. L'archive est une population secondaire servant à la conservation des meilleurs individus trouvés depuis le début de la recherche. Son usage est pertinent pour garder en mémoire les bons individus qui, par le jeu des sélections, ont disparu de la population principale. L'archive est mise à jour à chaque génération en comparant la Pareto-optimalité des individus constituant les deux populations. Un individu de la population principale ne peut entrer dans l'archive s'il est dominé par un individu de celle-ci. Inversement, tout individu de l'archive dominé par un individu de la population est retiré de l'archive. Si un membre de la population n'est dominé par aucun individu de l'archive, alors il y est ajouté. L'archive employée ici n'est pas limitée en taille de manière à permettre l'entrée au plus grand nombre d'individus.

Outre l'aspect de sauvegarde, l'archivage des élites peut constituer un bénéfice pour la recherche.^{164–167}

Des individus de l'archive peuvent en effet être réintroduits dans la population principale pour servir de « parents modèles ». Un tel usage de l'archive la qualifie « d'archive en ligne » (*online archive*) et est dénommé « injection d'archive » (*archive injection*). La réintroduction permet de diriger l'exploration vers un domaine contenant des solutions reconnues comme étant performantes et donc de relancer la recherche au cas où le potentiel exploratoire de la population est « épuisé ». Cet

épuisement survient parfois lorsque la combinaison de la sélection naturelle et des opérations génétiques n'est plus en mesure de faire progresser efficacement l'optimisation. Hamdy *et al.*¹⁶⁸ ont ainsi observé l'obtention d'un ensemble de Pareto plus proche du vrai front de Pareto avec une version de NSGA-II complétée d'une archive en ligne.

En outre, les algorithmes élitistes tel NSGA-II sont susceptibles d'attiser la déviation génétique de la population : les élites étant systématiquement privilégiées lors des sélections, la population tend à les multiplier et à perdre en diversité. Cette déviation entrave la recherche puisque la population est centrée autour de seulement quelques individus dont la conservation immuable empêche l'exploration. Pour relancer la recherche, il est possible de réinitialiser la population en retirant les doublons et en les remplaçant pour une partie par des individus aléatoires et pour l'autre par des membres de l'archive, de manière à ne pas faire repartir l'exploration de zéro. Ce mécanisme de régénération de la population sera plus amplement détaillé dans le chapitre en faisant usage.

2.3.4 Aide à la décision multicritères

Une optimisation multiobjectifs résulte en un ensemble de solutions optimales qu'il est impossible de distinguer au sens de Pareto. Aux yeux d'un preneur de décision, ces solutions sont autant d'alternatives viables ; cependant, pour des applications pratiques, il est nécessaire de ne retenir au final qu'un nombre très restreint de ces solutions. Opérer un tel choix peut s'avérer problématique dans le cas où l'algorithme d'optimisation fournit plusieurs centaines voire plusieurs milliers de solutions Pareto-optimales, dans un espace comportant plusieurs objectifs (trois, quatre, ou plus) : il faut par exemple choisir un individu parmi un « nuage » de plusieurs milliers de points dans un espace à plus de trois dimensions ; c'est une tâche délicate pour le cerveau humain. Ne pouvant se faire sur le critère de Pareto-optimalité, la discrimination de ces alternatives doit s'appuyer sur d'autres moyens par lesquels des préférences entre individus peuvent être formulées. Les méthodes d'aide à la décision multicritères permettent l'établissement de ces préférences et le classement des solutions. Parmi ces méthodes se trouvent les approches PROMETHEE (*preference ranking organization METHODS for enrichment evaluations*, méthodes d'organisation par classement de préférence pour évaluations d'enrichissement). Celles-ci désignent une série de techniques d'aide à la décision multicritères développée dans les années 1980¹⁶⁹ et largement utilisée à des fins variées, notamment dans les domaines de la logistique, du management et de la médecine.¹⁷⁰

Les méthodes PROMETHEE permettent d'ordonner les solutions en calculant la préférence de chacune par rapport aux autres. Cette préférence est déterminée à partir de comparaisons binaires et dépend de l'écart entre les valeurs des objectifs de deux alternatives, par exemple la différence de leur limite d'élasticité dans le cas d'alliages métalliques. Une différence importante conduit à une préférence forte et inversement.

En pratique, quelques paramètres doivent être définis ; le preneur de décision doit en effet :

- expliciter l'importance relative de chaque objectif en assignant des poids à chacun ;
- choisir une fonction donnant la préférence à partir de la différence entre la valeur des objectifs de deux alternatives. Cette fonction est dénommée « fonction de préférence » ;
- définir les paramètres de ladite fonction de préférence.

Il est ensuite possible de classer par ordre de préférence les solutions d'un ensemble de Pareto. Le type de classement dépend de la sous-technique PROMETHEE employée¹⁷¹ ; dans ce travail, le classement PROMETHEE II, décrit ci-après, est employé. À noter que les termes « objectifs » et « critères » sont utilisés de façon interchangeable, comme le sont les termes « alternatives », « solutions » et « individus ».

Soit A l'ensemble des n alternatives et $C_j(a)$ la valeur du critère j évalué pour l'individu $a \in A$ ($j = 1, \dots, m$, m étant le nombre de critères servant à la comparaison). La première étape de PROMETHEE consiste à définir et à calculer pour chaque critère j une fonction de préférence $P_j(a,b)$ pour toute paire d'alternatives $(a,b) \in A \times A$. Cette fonction quantifie la préférence de a par rapport à b . Variant de 0 à 1, celle-ci traduit l'augmentation de la préférence de a par rapport à b proportionnellement à la différence $d_j(a,b)$ entre $C_j(a)$ et $C_j(b)$. Plusieurs fonctions de préférence sont proposées par les auteurs de la méthode¹⁷¹; celle employée ici est la fonction « en V avec une zone d'indifférence », aussi connue sous le nom de « critère de type V » (figure 2.18). En fonction de la différence d_j (ou simplement d), la préférence P est :

$$P(a,b) = P(d) = \begin{cases} 0 & \text{if } d < r, \\ \frac{d-r}{s-r} & \text{if } r \leq d \leq s, \\ 1 & \text{if } d > s, \end{cases} \quad (2.19)$$

r et s sont deux constantes définies par le preneur de décision. r est un seuil d'indifférence : toutes alternatives dont la différence d est inférieure à cette valeur sont indistinctes. Une différence supérieure à r conduit à une préférence croissante d'une des deux alternatives, mais au-dessus d'un seuil de préférence stricte s la préférence prend une valeur maximale et ne croît plus, même si la différence d augmente.

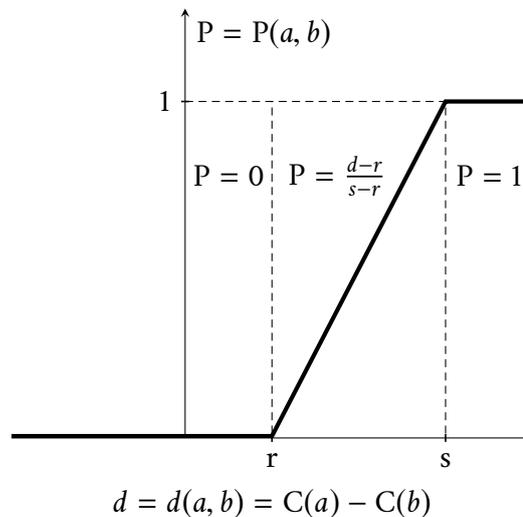


Figure 2.18 — Fonction de préférence de type V pour un critère, avec une zone d'indifférence ($d < r$), une zone de préférence linéaire ($r \leq d \leq s$) et une zone de préférence stricte ($d > s$). La préférence $P(a,b)$ d'une alternative a par rapport à une alternative b est tracée pour un critère en fonction de la différence $d = C(a) - C(b)$ entre la valeur de ce dernier pour les deux alternatives.

Le critère de type V est adapté aux critères quantitatifs et continus maniés dans ce travail.¹⁷² Les paramètres r et s peuvent être inférés à partir de l'ensemble A en suivant la méthodologie de Venkata Rao & Patel¹⁷³ qui leur affectent une fraction de la gamme de valeurs prises par chaque critère (respectivement 5 % et 30 %).

En outre, il est nécessaire de pondérer l'importance de chaque critère par un poids w_j , la préférence de a par rapport à b vis-à-vis du critère j devenant alors $w_j P_j(a,b)$. Le choix des poids par l'utilisateur est libre; cependant ceux-ci sont normalisés lors des calculs de sorte que leur somme soit égale à l'unité. Une fois la fonction de préférence et les poids définis, il est possible de calculer

une préférence globale de a par rapport à b :

$$\pi(a, b) = \sum_{j=1}^m w_j P_j(a, b) \quad (2.20)$$

Cette quantité varie également entre 0 et 1 et renseigne sur le degré de préférence multicritères. Identiquement, la préférence multicritères de b par rapport à a est :

$$\pi(b, a) = \sum_{j=1}^m w_j P_j(b, a) \quad (2.21)$$

En procédant à ce calcul pour chaque paire a et x , avec $x \in A$, la préférence globale de a par rapport à toutes les alternatives est :

$$\phi^+(a) = \frac{1}{n-1} \sum_{x \in A} \pi(a, x) \quad (2.22)$$

et la préférence de toutes les alternatives par rapport à a est :

$$\phi^-(a) = \frac{1}{n-1} \sum_{x \in A} \pi(x, a) \quad (2.23)$$

Les quantités $\phi^+(a)$ et $\phi^-(a)$ sont dénommées « flux de supériorité » positifs et négatifs (*positive/negative outranking flows*). Le flux positif représente le « pouvoir » de surclassement de a par rapport à ses alternatives et inversement pour le flux négatif. À partir de ceux-ci, il est possible de calculer le « flux net » (*net flow*) :

$$\phi(a) = \phi^+(a) - \phi^-(a) \quad (2.24)$$

Plus $\phi^+(a)$ ou $\phi(a)$ est grand et $\phi^-(a)$ faible, plus a représente une alternative performante selon les critères et leur pondération.

La sélection de la meilleure solution peut se faire sur la base du flux net (PROMETHEE II) ou des flux positifs et négatifs (PROMETHEE I). La seconde approche revient à reformuler le problème de décision multicritères en un problème d'optimisation biobjectifs dans lequel $\phi^+(a)$ doit être maximisé et $\phi^-(a)$ minimisé. La représentation de ce problème est utile pour visualiser le placement des alternatives; cette représentation $\phi^+ = f(\phi^-)$ est dénommée PROMETHEE DIAMOND¹⁷¹ et sera exploitée ultérieurement.

Les méthodes d'aide à la décision multicritères et en particulier PROMETHEE ont été relativement peu exploitées pour la sélection d'alliages métalliques. Maity & Chakraborty¹⁷⁴ ont utilisé PROMETHEE pour classer dix aciers à outils existants selon neuf critères qualitatifs et quantitatifs représentant leur performance dont le coût, la dureté, la résilience, le module d'Young, la conductivité thermique, la résistance à l'abrasion et l'usinabilité. Selon les auteurs, PROMETHEE, malgré sa simplicité mathématique, s'avère adéquat pour traiter ce type de problème en proposant l'intégration directe des préférences du preneur de décisions. Chatterjee & Chakraborty¹⁷⁵ ont comparé la méthode PROMETHEE II étendue (EXPROM2, une méthode connexe) avec trois autres outils d'aide à la décision sur un problème de sélection d'alliages existants pour engrenage vis-à-vis de cinq propriétés : la dureté en surface et à cœur, la résistance à la traction et les durées de vie en fatigue selon une sollicitation surfacique ou un pliage. EXPROM2 a aussi été employée pour déterminer le meilleur matériau pour un système de support d'outils parmi neuf alternatives existantes jugées sur six critères dont le coût, la dureté, le module d'Young, la résistance en compression et la résilience.¹⁷⁶ Le classement final est similaire pour toutes les méthodes exploitées, ce qui confirme la

compétitivité de PROMETHEE II. Anojkumar *et al.*¹⁷⁷ ont utilisé PROMETHEE pour classer cinq aciers inoxydables existants pour des applications de tuyauteries dans l'industrie sucrière selon sept caractéristiques : le coût, la limite d'élasticité, la résistance à la traction, l'allongement à la rupture, la dureté, la résistance à la corrosion et la résistance à l'abrasion. Là encore, l'approche produit un classement proche de celui fourni par d'autres outils. Des conclusions similaires sont tirées par Peng & Xiao,¹⁷⁸ qui se sont intéressés à la pertinence de PROMETHEE pour la sélection d'un alliage destiné à des roulements selon dix-neuf caractéristiques physicochimiques comprenant notamment le coût, la densité, la dureté, le coefficient de dilatation thermique, la conductivité thermique et la résistance à la corrosion.

Ces travaux sont relativement similaires car :

- i. ceux-ci se concentrent sur « l'optimisation de l'existant » et pas sur « la conception de l'optimal¹⁷⁹ » : la sélection est opérée sur une liste fixe de matériaux existants ayant déjà été évalués pour un usage pratique ;
- ii. dans certaines études, les candidats ne sont pas tous non-dominés, de sorte que certains pourraient être écartés d'emblée ;
- iii. le nombre d'alternatives considérées est faible (dix ou moins) ; un expert serait probablement en mesure de choisir le meilleur candidat sans assistance de l'analyse décisionnelle.

Dans le présent travail, l'usage fait de l'aide à la décision multicritères et en particulier de PROMETHEE diffère en cela que, respectivement aux points i. à iii. :

- a. la sélection suit un processus d'optimisation ; le classement contient donc des matériaux potentiellement entièrement nouveaux ;
- b. ces matériaux sont Pareto-optimaux puisqu'ils sont générés par des algorithmes génétiques multiobjectifs basés sur la domination de Pareto. La sélection est donc conduite sur des alternatives vraiment incomparables ;
- c. la taille de l'ensemble de Pareto, représentant l'ensemble des alternatives, est de quelques centaines voire quelques milliers d'alliages, soit un à deux ordres de grandeur supérieur à la taille de la plupart des problèmes de la littérature.

2.3.5 Synthèse

Dans ce travail, il sera fait usage des algorithmes génétiques pour l'optimisation multiobjectifs de la composition d'alliages métalliques (superalliages à base de nickel et alliages à forte entropie) vis-à-vis d'un certain nombre de leurs caractéristiques. L'optimisation donnera lieu à la découverte d'ensembles de compromis parmi lesquels quelques alliages seront sélectionnés soit manuellement, soit à l'aide de PROMETHEE, une méthode d'aide à la décision multicritères compétitive. Cette approche *a posteriori*,¹⁸⁰ privilégiée car conceptuellement simple, comporte plusieurs inconvénients qui seront discutés et nuancés dans le premier chapitre applicatif.

Références

1. KAUFMAN, L. & BERNSTEIN, H. [Computer Calculation of Phase Diagrams: with Special Reference to Refractory Metals](#), Academic Press, New York (1970), ISBN : 978-0-12-402050-4, cf. pages 4, 18.
3. BHADESHIA, H. K. D. H., MACKAY, C. & SVENSSON, E. [Impact toughness of C-Mn steel arc welds: Bayesian neural network analysis](#), *Materials Science and Technology* **11** (10), 1046–1051 (1995), cf. pages 5, 28.

4. JONES, J. & MACKEY, D. J. C. [Neural network modelling of the mechanical properties of nickel base superalloys](#), *Superalloys 1996 (Eighth International Symposium)*, 417–424, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (1996), cf. pages 5, 28, 35.
5. BAILER-JONES, C. A. L., BHADSHIA, H. K. D. H. & MACKEY, D. J. C. [Gaussian process modelling of austenite formation in steel](#), *Materials Science and Technology* **15** (3), 287–294 (1999), cf. pages 5, 35.
10. BRUN, F., YOSHIDA, T., ROBSON, J. D., NARAYAN, V., BHADSHIA, H. K. D. H. & MACKEY, D. J. C. [Theoretical design of ferritic creep resistant steels using neural network, kinetic, and thermodynamic models](#), *Materials Science and Technology* **15** (5), 547–554 (1999), cf. pages 5, 21, 28.
11. SMALL, C. J. & SAUNDERS, N. [The Application of CALPHAD Techniques in the Development of a New Gas-Turbine Disk Alloy](#), *Materials Research Society Bulletin* **24** (4), 22–26 (1999), cf. pages 5, 21.
12. SAUNDERS, N., FAHRMANN, M. & SMALL, C. J. [The Application of CALPHAD Calculations to Ni-Based Superalloys](#), *Superalloys 2000 (Ninth International Symposium)*, 803–811, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2000), cf. pages 5, 21.
13. MALINOVA, T., PANTEV, N. & MALINOV, S. [Prediction of surface hardness after ferritic nitrocarburising of steels using artificial neural networks](#), *Materials Science and Technology* **17** (2), 168–174 (2001), cf. pages 5, 28, 29.
14. SCHAFFERNAK, B. C. & CERJAK, H. H. [Design of Improved Heat Resistant Materials by Use of Computational Thermodynamics](#), *Calphad* **25** (2), 241–251 (2001), cf. pages 5, 21.
15. TANCRET, F., BHADSHIA, H. K. D. H. & MACKEY, D. J. C. [Design of a creep resistant nickel base superalloy for power plant applications: Part 1 — Mechanical properties modelling](#), *Materials Science and Technology* **19** (3), 283–290 (2003), cf. pages 5, 21, 35, 77, 78, 103.
16. DE CARLAN, Y., MURUGANANTH, M., SOURMAIL, T. & BHADSHIA, H. K. D. H. [Design of new Fe-9CrWV reduced-activation martensitic steels for creep properties at 650 °C](#), *Journal of Nuclear Materials* **329-333** (Part A), 238–242 (2004), cf. pages 5, 28.
17. YOO, Y. S., KIM, I. S., KIM, D. H., JO, C. Y., KIM, H. M. & JONES, C. N. [The Application of Neural Network to the Development of Single Crystal Superalloys](#), *Superalloys 2004 (Tenth International Symposium)*, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2004), cf. pages 5, 28.
18. KNEŽEVIĆ, V., BALUN, J., SAUTHOFF, G., INDEN, G. & SCHNEIDER, A. [Design of martensitic/ferritic heat-resistant steels for application at 650 °C with supporting thermodynamic modelling](#), *Materials Science and Engineering A* **477** (1-2), 334–343 (2008), cf. pages 5, 21.
20. BHATTACHARYYA, T., SINGH, S. B., SIKDAR (DEY), S., BHATTACHARYYA, S., BLECK, W. & BHATTACHARJEE, D. [Microstructural prediction through artificial neural network \(ANN\) for development of transformation induced plasticity \(TRIP\) aided steel](#), *Materials Science and Engineering A* **565**, 148–157 (2013), cf. pages 5, 28.
21. CRUDDEN, D. J., RAEISINIA, B., WARNKEN, N. & REED, R. C. [Analysis of the chemistry of Ni-base turbine disk superalloys using an alloys-by-design modeling approach](#), *Metallurgical and Materials Transactions A* **44** (5), 2418–2430 (2013), cf. pages 5, 21, 28.
22. HUANG, H., SHERIF, M. Y. & RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. [Combinatorial optimization of carbide-free bainitic nanostructures](#), *Acta Materialia* **61** (5), 1639–1647 (2013), cf. pages 5, 21.

23. CRUDDEN, D. J., MOTTURA, A., WARNKEN, N., RAEISINIA, B. & REED, R. C. Modelling of the influence of alloy composition on flow stress in high-strength nickel-based superalloys, *Acta Materialia* **75**, 356–370 (2014), cf. pages 5, 21.
24. GAO, M. C., CARNEY, C. S., DOĞAN, Ö. N., JABLONKSI, P. D., HAWK, J. A. & ALMAN, D. E. Design of Refractory High-Entropy Alloys, *Journal of Materials* **67** (11), 2653–2669 (2015), cf. pages 5, 22.
25. GUO, J., LIAO, B., LIU, L., GAO, Y., REN, X. & YANG, Q. Composition Optimization and Experimental Characterization of a Novel Steel Based on CALPHAD, *Journal of Materials Engineering and Performance* **24** (5), 2099–2107 (2015), cf. pages 5, 21.
27. MAHFOUF, M. Optimal Design of Alloy Steels Using Genetic Algorithms. *Advances in Computational Intelligence and Learning: Methods and Applications* 425–436, Springer Netherlands, Dordrecht (2002), cf. pages 6, 8, 41.
28. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & van der ZWAAG, S. Designing nanoprecipitation strengthened UHS stainless steels combining genetic algorithms and thermodynamics, *Computational Materials Science* **44** (2), 678–689 (2008), cf. pages 6, 8, 21, 42.
29. DAS, P., MUKHERJEE, S., GANGULY, S., BHATTACHARYAY, B. K. & DATTA, S. Genetic algorithm based optimization for multi-physical properties of HSLA steel through hybridization of neural network and desirability function, *Computational Materials Science* **45** (1), 104–110 (2009), cf. pages 6, 8, 42.
30. TANCRET, F. Computational thermodynamics, Gaussian processes and genetic algorithms: combined tools to design new alloys, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **21** (4) N°045013 (2013), cf. pages 6, 8, 21, 35, 42.
31. CONDUIT, B. D., JONES, N. G., STONE, H. J. & CONDUIT, G. J. Concurrent materials design En ligne : <http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/~gjc29/Papers/ConduitJonesStoneConduit14.pdf> (visité le 15/07/2016) (2014), cf. pages 6, 8, 28, 44.
32. RETTIG, R., RITTER, N. C., HELMER, H. E., NEUMEIER, S. & SINGER, R. F. Single-crystal nickel-based superalloys developed by numerical multi-criteria optimization techniques: design based on thermodynamic calculations and experimental validation, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **23** (3) N°035004 (2015), cf. pages 8, 44.
34. SUN, Y., ZENG, W. D., HAN, Y. F., MA, X. & ZHAO, Y. Q. Optimization of chemical composition for TC11 titanium alloy based on artificial neural network and genetic algorithm, *Computational Materials Science* **50** (3), 1064–1069 (2011), cf. pages 8, 28, 42.
35. REDDY, N. S., KRISHNAIAH, J., YOUNG, H. B. & LEE, J. S. Design of medium carbon steels by computational intelligence techniques, *Computational Materials Science* **101**, 120–126 (2015), cf. pages 8, 42.
36. RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & XU, W. Heat Treatment and Composition Optimization of Nanoprecipitation Hardened Alloys, *Materials and Manufacturing Processes* **26** (3), 375–381 (2011), cf. pages 8, 21, 42.
37. TANCRET, F. Computational thermodynamics and genetic algorithms to design affordable γ' -strengthened nickel-iron based superalloys, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **20** (4) N°045012 (2012), cf. pages 8, 21, 35, 42, 209.
38. LU, Q., van der ZWAAG, S. & XU, W. High-throughput design of low-activation, high-strength creep-resistant steels for nuclear-reactor applications, *Journal of Nuclear Materials* **469**, 217–222 (2016), cf. pages 8, 21, 42.

39. MAHFOUF, M., JAMEI, M. & LINKENS, D. A. [Optimal Design of Alloy Steels Using Multiobjective Genetic Algorithms](#), *Materials and Manufacturing Processes* **20** (3), 553–567 (2005), cf. pages 8, 27, 43.
40. EGOROV-YEGOROV, I. N. & DULIKRAVICH, G. S. [Chemical Composition Design of Superalloys for Maximum Stress, Temperature, and Time-to-Rupture Using Self-Adapting Response Surface Optimization](#), *Materials and Manufacturing Processes* **20** (3), 569–590 (2005), cf. pages 8, 30, 38, 44.
41. ZHANG, Q. & MAHFOUF, M. [A nature-inspired multi-objective optimisation strategy based on a new reduced space searching algorithm for the design of alloy steels](#), *Engineering Applications of Artificial Intelligence* **23** (5), 660–675 (2010), cf. pages 8, 43.
42. BHARGAVA, S., DULIKRAVICH, G. S., MURTY, G. S., AGARWAL, A. & COLAÇO, M. J. [Stress Corrosion Cracking Resistant Aluminum Alloys: Optimizing Concentrations of Alloying Elements and Tempering](#), *Materials and Manufacturing Processes* **26** (3), 363–374 (2011), cf. pages 8, 44.
43. KUMAR, A., CHAKRABARTI, D. & CHAKRABORTI, N. [Data-Driven Pareto Optimization for Microalloyed Steels Using Genetic Algorithms](#), *Steel Research International* **83** (2), 169–174 (2012), cf. pages 8, 28, 43.
44. JHA, R., PETTERSSON, F., DULIKRAVICH, G. S., SAXEN, H. & CHAKRABORTI, N. [Evolutionary Design of Nickel-Based Superalloys Using Data-Driven Genetic Algorithms and Related Strategies](#), *Materials and Manufacturing Processes* **30** (4), 488–510 (2015), cf. pages 8, 28, 30, 31, 43.
45. PATTANAYAK, S., DEY, S., CHATTERJEE, S., CHOWDHURY, S. G. & DATTA, S. [Computational intelligence based designing of microalloyed pipeline steel](#), *Computational Materials Science* **104**, 60–68 (2015), cf. pages 8, 28, 43.
46. DEY, S., GANGULY, S. & DATTA, S. [In silico Design of High Strength Aluminium Alloy Using Multi-objective GA](#). *Swarm, Evolutionary, and Memetic Computing: 5th International Conference (SEMCCO 2014)* 316–327, Springer International Publishing (2015), cf. pages 8, 28, 43.
50. MIRACLE, D. B., MILLER, J. D., SENKOV, O. N., WOODWARD, C., UCHIC, M. D. & TILEY, J. [Exploration and development of high entropy alloys for structural applications](#), *Entropy* **16** (1), 494–525 (2014), cf. pages 9, 22, 157.
51. DONACHIE, M. J. [Superalloys: A Technical Guide, 2nd Edition](#), American Society for Metals, Materials Park, OH (2002), ISBN : 978-0-87170-749-9, cf. pages 16, 67, 70.
52. AUGUSTINS-LECALLIER, I. [Conception de nouveaux superalliages MDP base nickel pour disques de turbines](#), thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris (2011), cf. page 17.
53. BILLOT, T. [Comportement et endommagement en fatigue et fatigue-fluage à haute température de différents états microstructuraux du superalliage base-nickel Udimet 720](#), thèse de doctorat, École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, Poitiers (2010), cf. page 17.
54. LICAVOLI, J. J., JABLONSKI, P. D., GAO, M. C., HOLCOMB, G. & HAWK, J. A. [Enhanced Entropy Superalloy Development For Fossil Energy Applications \(IPT Task 3.3\)](#). NETL-Crosscutting Review Meeting 2015, cf. page 17.
55. OKAMOTO, H. [Desk Handbook: Phase Diagrams for Binary Alloys](#), American Society for Metals (2010), ISBN : 978-0-615-03046-3, cf. page 18.

56. KATTNER, U. R. [The Thermodynamic Modeling of Multicomponent Phase Equilibria](#), *Journal of Materials* **49** (12), 14–19 (1997), cf. page 19.
57. BALE, C. W., BÉLISLE, E., CHARTRAND, P., DECTEROV, S. A., ERIKSSON, G., HACK, K., JUNG, I.-H., KANG, Y.-B., MELANÇON, J., PELTON, A. D., ROBELIN, C. & PETERSEN, S. [FactSage thermochemical software and databases — recent developments](#), *Calphad* **33** (2), 295–311 (2009), cf. page 20.
58. SAUNDERS, N., LI, X., MIODOWNIK, P. & SCHILLÉ, J. P. [Computer Modelling of Materials Properties](#), *Materials Design Approaches and Experiences*, 185–197, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2001), cf. page 20.
59. KOZESCHNIK, E. [Simulation of precipitation kinetic in interstitial-free and bake-hardening steel](#), thèse de doctorat, Technical University Graz (1997), cf. page 20.
60. DAVIES, R. H., DINSDALE, A. T., GISBY, J. A., ROBINSON, J. A. J. & MARTIN, S. M. [MTDATA — Thermodynamic and phase equilibrium software from the national physical laboratory](#), *Calphad* **26** (2), 229–271 (2002), cf. page 20.
61. CHANG, Y. A., YAN, X. Y., DANIEL, S. L., XIE, F. Y., CHEN, S. L. & ZHANG, F. [PANDAT and PanEngine — Their applications in multicomponent phase diagram calculation and microstructure prediction](#), *TMS Fall Meeting*, 85–96, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2001), cf. page 20.
62. SUNDMAN, B., JANSSON, B. & ANDERSSON, J. O. [The Thermo-Calc databank system](#), *Calphad* **9** (2), 153–190 (1985), cf. page 20.
63. ANDERSSON, J. O., HELANDER, T., HÖGLUND, L., SHI, P. & SUNDMAN, B. [Thermo-Calc & DICTRA, computational tools for materials science](#), *Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* **26** (2), 273–312 (2002), cf. page 20.
64. FURTADO, J. & LAIGO, J. [Alliages fer-nickel-chrome stables à haute température](#), Brevet INPI N°FR 2 939 808-B1. (2011), cf. pages 21, 38.
65. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & van der ZWAAG, S. [A combined optimization of alloy composition and aging temperature in designing new UHS precipitation hardenable stainless steels](#), *Computational Materials Science* **45** (2), 467–473 (2009), cf. pages 21, 42.
66. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & van der ZWAAG, S. [Computational design of UHS maraging stainless steels incorporating composition as well as austenitisation and ageing temperatures as optimisation parameters](#), *Philosophical Magazine* **89** (20), 1647–1661 (2009), cf. pages 21, 42.
67. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J., WANG, W., YANG, K., BLIZNUK, V., KESTENS, L. A. I. & van der ZWAAG, S. [Genetic design and characterization of novel ultra-high-strength stainless steels strengthened by Ni₃Ti intermetallic nanoprecipitates](#), *Acta Materialia* **58** (10), 3582–3593 (2010), cf. pages 21, 42.
68. LU, Q., XU, W. & van der ZWAAG, S. [Computational design of precipitation strengthened austenitic heat-resistant steels](#), *Philosophical Magazine* **93** (25), 3391–3412 (2013), cf. page 21.
69. LU, Q., XU, W. & van der ZWAAG, S. [The design of a compositionally robust martensitic creep-resistant steel with an optimized combination of precipitation hardening and solid-solution strengthening for high-temperature use](#), *Acta Materialia* **77**, 310–323 (2014), cf. pages 21, 42.
70. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & van der ZWAAG, S. [Genetic alloy design based on thermodynamics and kinetics](#), *Philosophical Magazine* **88** (12), 1825–1833 (2008), cf. pages 21, 42, 76.

71. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J., YAN, W., YANG, K., SAN MARTÍN, D., KESTENS, L. A. I. & VAN DER ZWAAG, S. *A new ultrahigh-strength stainless steel strengthened by various coexisting nanoprecipitates*, *Acta Materialia* **58** (11), 4067–4075 (2010), cf. pages 21, 42.
72. LU, Q., XU, W. & van der ZWAAG, S. *The Computational Design of W and Co-Containing Creep-Resistant Steels with Barely Coarsening Laves Phase and $M_{23}C_6$ as the Strengthening Precipitates*, *Metallurgical and Materials Transactions A* **45** (13), 6067–6074 (2014), cf. pages 21, 42.
73. XU, X., XU, W., EDERVEEN, F. H. & van der ZWAAG, S. *Design of low hardness abrasion resistant steels*, *Wear* **301** (1-2), 89–93 (2013), cf. page 21.
74. DEVAUX, A., PICQUÉ, B., GERVAIS, M. F., GEORGES, E., POULAIN, T. & HÉRITIER, P. *AD730™ — A new nickel based superalloy for high temperature engine rotative parts*, *Superalloys 2012 (12th International Symposium on Superalloys)*, 911–919, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2012), cf. pages 21, 110, 116.
75. PATEL, S. J., DE BARBADILLO, J. J., BAKER, B. A. & GOLLIHUE, R. D. *Nickel base superalloys for next generation coal fired AUSC power plants*, *Procedia Engineering* **55**, 246–252 (2013), cf. pages 21, 68.
76. TANCRET, F. & BHADESHIA, H. K. D. H. *Design of a creep resistant nickel base superalloy for power plant applications: Part 2 — Phase diagram and segregation simulation*, *Materials Science and Technology* **19** (3), 291–295 (2003), cf. page 21.
77. TANCRET, F., SOURMAIL, T., YESCAS, M. A., EVANS, R. W., MCALEESE, C., SINGH, L., SMEETON, T. & BHADESHIA, H. K. D. H. *Design of a creep resistant nickel base superalloy for power plant applications: Part 3 — Experimental results*, *Materials Science and Technology* **19** (3), 296–302 (2003), cf. pages 21, 35.
78. TANCRET, F., GALINDO-NAVA, E. & RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. *Dynamic recrystallisation model in precipitation-hardened superalloys as a tool for the joint design of alloys and forming processes*, *Materials & Design* **103**, 293–299 (2016), cf. pages 21, 208.
79. GAO, M. & ALMAN, D. *Searching for Next Single-Phase High-Entropy Alloy Compositions*, *Entropy* **15** (10), 4504–4519 (2013), cf. pages 21, 157.
80. YEH, A. C., TSAO, T. K., CHANG, Y. J., CHANG, K. C., YEH, J. W., CHIOU, M. S., JIAN, S. R., KUO, C. M., WANG, W. R. & MURAKAMI, H. *Developing New Type of High Temperature Alloys — High Entropy Superalloys*, *International Journal of Metallurgical & Materials Engineering* **1** (107), 1–4 (2015), cf. pages 22, 209.
81. ZHANG, F., ZHANG, C., CHEN, S. L., ZHU, J., CAO, W. S. & KATTNER, U. R. *An understanding of high entropy alloys from phase diagram calculations*, *Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* **45**, 1–10 (2014), cf. pages 22, 156.
82. LIU, Y. Q., FAN, Z. & PATEL, J. *Thermodynamic approach to aluminium alloys design for semisolid metal processing*, *7th S2P Advanced Semi-Solid Processing of Alloys and Composites*, 599–604, National Institute of Advanced Industrial Science et Technology, Tsukuba, Japan (2002), cf. page 22.
83. LIU, Y. Q., SHEN, J. Y., YUE, Q., CHU, M. Y., WANG, X. Z. & WANG, D. C. *Alloy Development and Process Optimization for a New High Strength and High Toughness Titanium Alloys Ti-63*, *Materials Science Forum* **675–677**, 905–908 (2011), cf. page 22.
84. *Thermo-Calc Software AB*. En ligne : <http://www.thermocalc.com/> (visité le 06/05/2016), cf. page 22.

85. *Thermo-Calc Software TCNI7 Ni-based Superalloys Database version 7*. En ligne : www.thermocalc.com/media/23655/dbd_tcni7_extended_info.pdf (visité le 06/05/2016), cf. pages 22, 157.
86. *Thermotech TTNI8 Ni-based Superalloys Database version 8*. En ligne : http://www.thermocalc.com/media/5980/dbd_ttni8_bh.pdf (visité le 06/05/2016), cf. pages 22, 157.
87. *Thermo-Calc Software TCFE8 Steels and Fe-alloys database version 8*. En ligne : http://www.thermocalc.com/media/10306/dbd_tcf8_extendedinfo.pdf (visité le 21/08/2016), cf. pages 22, 157.
88. *Scientific Group Thermodata Europe Solutions Database version 5*. En ligne : www.thermocalc.com/media/8160/ssol5_extended_info-2.pdf (visité le 06/05/2016), cf. pages 23, 157.
89. McCULLOCH, W. S. & PITTS, W. H. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity, *Bulletin of Mathematical Biophysics* **5**, 115–133 (1943), cf. page 25.
90. BHADSHIA, H. Neural Networks in Materials Science, *ISIJ International* **39** (10), 966–979 (1999), cf. page 25.
91. ROSENBLATT, F. The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain, *Psychological Review* **65** (6), 386–408 (1958), cf. page 27.
92. RUMELHART, D. E., HINTON, G. E. & WILLIAMS, R. J. Foundations. *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition* (éds. RUMELHART, D. E. & MCCLELLAND, J. L.) 318–362, The MIT Press, Cambridge (1986), ISBN : 978-0-262-68053-0, cf. page 27.
93. COOL, T., BHADSHIA, H. K. D. H. & MACKAY, D. J. C. The yield and ultimate tensile strength of steel weld metals, *Materials Science and Engineering A* **223** (1–2), 186–200 (1997), cf. page 27.
94. BADMOS, A. Y. & BHADSHIA, H. K. D. H. Tensile properties of mechanically alloyed oxide dispersion strengthened iron alloys Part 1 — Neural network models, *Materials Science and Technology* **14** (8), 793–809 (1998), cf. pages 27, 28.
95. METZBOWER, E. A., DELOACH, J. J., LALAM, S. H. & BHADSHIA, H. K. D. H. Neural network analysis of strength and ductility of welding alloys for high strength low alloy shipbuilding steels, *Science and Technology of Welding and Joining* **6** (2), 116–124 (2001), cf. pages 27, 28.
96. DATTA, S., PETTERSSON, F., GANGULY, S. & SAXÉN, H. Designing High Strength Multi-phase Steel for Improved Strength-Ductility Balance Using Neural Networks and Multi-objective Genetic Algorithms, *ISIJ International* **47** (8), 1195–1203 (2007), cf. page 27.
97. JOO, M., RYU, J. & BHADSHIA, H. K. D. H. Domains of steels with identical properties, *Materials and Manufacturing Processes* **24**, 53–58 (2009), cf. pages 27, 42.
98. REDDY, N. S., KRISHNAIAH, J., HONG, S. G. & LEE, J. S. Modeling medium carbon steels by using artificial neural networks, *Materials Science and Engineering: A* **508** (1–2), 93–105 (2009), cf. pages 27, 28.
99. MOHANTY, I., BHATTACHARJEE, D. & DATTA, S. Designing cold rolled IF steel sheets with optimized tensile properties using ANN and GA, *Computational Materials Science* **50** (8), 2331–2337 (2011), cf. pages 27, 43.
100. DEY, S., SULTANA, N., KAISER, M. S., DEY, P. & DATTA, S. Computational intelligence based design of age-hardenable aluminium alloys for different temperature regimes, *Materials and Design* **92**, 522–534 (2016), cf. pages 28, 43.
101. DI MARTINO, I., BROOKS, J. W., REED, P. A. S., HOLDWAY, P. & WISBEY, A. Adaptive numerical modelling of high temperature strength, creep and fatigue behaviour in Ni based superalloys, *Materials Science and Technology* **23** (12), 1402–1407 (2007), cf. page 28.

102. GRYLLS, R. J. [Mechanical properties of a high-strength cupronickel alloy — Bayesian neural network analysis](#), *Materials Science and Engineering: A* **234-236**, 267–270 (1997), cf. page 28.
103. SOURMAIL, T., BHADSHIA, H. K. D. H. & MACKAY, D. J. C. [Neural network model of creep strength of austenitic stainless steels](#), *Materials Science and Technology* **18** (6), 655–663 (2002), cf. page 28.
104. VENKATESH, V. [A neural network approach to elevated temperature creep-fatigue life prediction](#), *International Journal of Fatigue* **21** (3), 225–234 (1999), cf. page 28.
105. MURUGANANTH, M. [Metaheuristic Multiobjective Optimization in Steel Welds](#), *Materials and Manufacturing Processes* **24** (2), 230–239 (2009), cf. pages 28, 43.
106. MALINOV, S., SHA, W. & MCKEOWN, J. J. [Modelling the correlation between processing parameters and properties in titanium alloys using artificial neural network](#), *Computational Materials Science* **21** (3), 375–394 (2001), cf. page 28.
107. FUJII, H., MACKAY, D. J. C. & BHADSHIA, H. K. D. H. [Bayesian neural network analysis of fatigue crack growth rate in nickel base superalloys](#), *ISIJ international* **36** (11), 1373–1382 (1996), cf. page 28.
108. MALINOV, S. & SHA, W. [Application of artificial neural networks for modelling correlations in titanium alloys](#), *Materials Science and Engineering A* **365** (1–2), 202–211 (2004), cf. pages 28, 29.
109. GAVARD, L., BHADSHIA, H. K. D. H., MACKAY, D. J. C. & SUZUKI, S. [Bayesian neural network model for austenite formation in steels](#), *Materials Science and Technology* **12** (6), 453–463 (1996), cf. page 28.
110. VERMEULEN, W. G., MORRIS, P. F., de WEIJER, A. P. & van der ZWAAG, S. [Prediction of martensite start temperature using artificial neural networks](#), *Ironmaking and Steelmaking* **23** (5), 433–437 (1996), cf. page 28.
111. SOURMAIL, T. & GARCIA-MATEO, C. [A model for predicting the \$M_s\$ temperatures of steels](#), *Computational Materials Science* **34** (2), 213–218 (2005), cf. page 28.
112. GARCIA-MATEO, C., CAPDEVILA, C., CABALLERO, F. G. & DE ANDRÉS, C. G. [Artificial neural network modeling for the prediction of critical transformation temperatures in steels](#), *Journal of Materials Science* **42** (14), 5391–5397 (2007), cf. page 28.
113. KEMP, R., COTTRELL, G. A., BHADSHIA, H. K. D. H., ODETTE, G. R., YAMAMOTO, T. & KISHIMOTO, H. [Neural-network analysis of irradiation hardening in low-activation steels](#), *Journal of Nuclear Materials* **348** (3), 311–328 (2006), cf. page 28.
114. COTTRELL, G. A., KEMP, R., BHADSHIA, H. K. D. H., ODETTE, G. R. & YAMAMOTO, T. [Neural network analysis of Charpy transition temperature of irradiated low-activation martensitic steels](#), *Journal of Nuclear Materials* **367-370**, 603–609 (2007), cf. page 28.
115. ICHIKAWA, K., BHADSHIA, H. K. D. H. & MACKAY, D. J. C. [Model for Solidification Cracking in Low Alloy Steel Weld Metals](#), *Science and Technology of Welding and Joining* **1** (1), 43–50 (1996), cf. page 28.
116. VASUDEVAN, M., BHADURI, A. K., RAJ, B. & RAO, K. P. [Artificial neural network modelling of solidification mode in austenitic stainless steel welds](#), *Materials Science and Technology* **23** (4), 451–459 (2007), cf. page 28.
117. CHATTERJEE, S., MURUGANANTH, M. & BHADSHIA, H. K. D. H. [\$\delta\$ TRIP steel](#), *Materials Science and Technology* **23** (7), 819–827 (2007), cf. pages 28, 42.

118. MOUSAVI ANIJ DAN, S. H. & BAHRAMI, A. A new method in prediction of TCP phases formation in superalloys, *Materials Science and Engineering A* **396** (1–2), 138–142 (2005), cf. page 28.
119. PEET, M. J., HASAN, H. S. & BHADOSHIA, H. K. D. H. Prediction of thermal conductivity of steel, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **54** (11–12), 2602–2608 (2011), cf. page 29.
120. XIA, X., NIE, J. F., DAVIES, C. H. J., TANG, W. N., XU, S. W. & BIRBILIS, N. An artificial neural network for predicting corrosion rate and hardness of magnesium alloys, *Materials & Design* **90**, 1034–1043 (2016), cf. page 29.
121. MAC KAY, D. J. C. Probable networks and plausible predictions — a review of practical Bayesian methods for supervised neural networks, *Network: Computation in Neural Systems* **6** (3), 469–505 (1995), cf. page 29.
122. MAC KAY, D. J. C. A Practical Bayesian Framework for Backpropagation Networks, *Neural Computation* **4** (3), 448–472 (1992), cf. pages 29, 35.
123. KOZA, J. R. Genetic programming: on the programming of computers by means of natural selection, The MIT Press, Cambridge (1992), ISBN : 978-0-262-11170-6, cf. page 29.
124. KOVACIC, M., URATNIK, P., BREZOCNIK, M. & TURK, R. Prediction of the Bending Capability of Rolled Metal Sheet by Genetic Programming, *Materials and Manufacturing Processes* **22** (5), 634–640 (2007), cf. page 30.
125. ESKIL, M. & KANCA, E. A new formulation for martensite start temperature of Fe-Mn-Si shape memory alloys using genetic programming, *Computational Materials Science* **43** (4), 774–784 (2008), cf. page 30.
126. DIMITRIU, R. C., BHADOSHIA, H. K. D. H., FILLON, C. & POLONI, C. Strength of Ferritic Steels: Neural Networks and Genetic Programming, *Materials and Manufacturing Processes* **24** (1), 10–15 (2009), cf. page 31.
127. SMOLA, A. Regression estimation with support vector learning machines, thèse de master, Technische Universität München (1996), cf. page 31.
128. BOSER, B. E., GUYON, I. M. & VAPNIK, V. N. A Training Algorithm for Optimal Margin Classifiers, *Proceedings of the Fifth Annual ACM Workshop on Computational Learning Theory — COLT'92*, 144–152, Association for Computing Machinery, New York, NY (1992), cf. pages 31, 32.
129. SMOLA, A. J. & SCHOLKOPF, B. A tutorial on support vector regression, *Statistics and Computing* **14** (3), 199–222 (2004), cf. pages 31, 32.
130. FEMMINELLA, O. P., STARINK, M. J., GUNN, S. R., HARRIS, C. J. & REED, P. A. S. Neuro-fuzzy and SUPANOVA Modelling of Structure-Property Relationships in Al-Zn-Mg-Cu Alloys, *Materials Science Forum* **331-337**, 1255–1260 (2000), cf. page 32.
131. FANG, S. F., WANG, M. P. & SONG, M. An approach for the aging process optimization of Al-Zn-Mg-Cu series alloys, *Materials and Design* **30** (7), 2460–2467 (2009), cf. page 32.
132. FANG, S. F., WANG, M. P., WANG, Y. H., QI, W. H. & LI, Z. Evolutionary artificial neural network approach for predicting properties of Cu-15Ni-8Sn-0.4Si alloy, *Transactions of Non-ferrous Metals Society of China (English Edition)* **18** (5), 1223–1228 (2008), cf. page 32.
133. WANG, L., MU, Z. & GUO, H. Application of support vector machine in the prediction of mechanical property of steel materials, *Journal of University of Science and Technology Beijing* **13** (6), 512–515 (2006), cf. page 32.

134. PEI, J. F., CAI, C. Z., ZHU, X. J. & WANG, G. L. Investigation on the Processing-Properties of Hot Deformed TA15 Titanium Alloy via Support Vector Regression, *Materials Science Forum* **689**, 134–143 (2011), cf. page 32.
135. RASMUSSEN, C. E. Evaluation of Gaussian processes and other methods for non-linear regression, thèse de doctorat, University of Toronto (1996), cf. page 33.
136. MATHERON, G. *Traité de géostatistique appliquée*, Technip, Paris (1962), cf. page 33.
137. GIBBS, M. N. Bayesian Gaussian processes for regression and classification, thèse de doctorat, University of Cambridge (1998), cf. page 33.
138. RASMUSSEN, C. E. & WILLIAMS, C. K. I. *Gaussian processes for machine learning*, The MIT Press, Cambridge (2006), ISBN : 978-0-262-18253-9, cf. pages 34, 35.
139. DUVENAUD, D. K. Automatic Model Construction with Gaussian Processes, thèse de doctorat, Pembroke College, University of Cambridge (2014), cf. page 34.
140. TANCRET, F., BHADESHIA, H. K. D. H. & MACKEY, D. J. C. Comparison of artificial neural networks with Gaussian processes to model the yield strength of nickel-base superalloys, *ISIJ International* **39** (10), 1020–1026 (1999), cf. page 35.
141. TANCRET, F. & BELLINI, M. Properties, processability and weldability of a novel affordable creep resistant nickel base superalloy, *Materials Science and Technology* **24** (4), 479–487 (2008), cf. page 35.
142. NEAL, R. M. *Bayesian Learning for Neural Networks*, Springer, New York (1996), ISBN : 978-0-387-94724-2, cf. page 35.
143. NABNEY, I. *NETLAB: Algorithms for Pattern Recognition*, Springer, New York (2002), ISBN : 978-1-85233-440-6, cf. pages 36, 79.
144. THE MATHWORKS INC. *MATLAB 2013b*. Natick, MA (2013), cf. pages 36, 161.
145. HOLLAND, J. H. Genetic Algorithms and the Optimal Allocation of Trials, *SIAM Journal on Computing* **2** (2), 88–105 (1973), cf. page 39.
146. HOLLAND, J. H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, University of Michigan Press, Ann Arbor (1975), ISBN : 978-0-262-58111-0, cf. page 39.
147. DARWIN, C. *On the Origin of the Species*, John Murray, London (1859), cf. page 39.
148. PASZKOWICZ, W. Genetic Algorithms, a Nature-Inspired Tool: Survey of Applications in Materials Science and Related Fields: Part II, *Materials and Manufacturing Processes* **28** (7), 708–725 (2013), cf. page 41.
149. XU, W. & van der ZWAAG, S. Property and Cost Optimisation of Novel UHS Stainless Steels via a Genetic Alloy Design Approach, *ISIJ International* **51** (6), 1005–1010 (2011), cf. page 42.
150. PARETO, V. *Manual of Political Economy : A Variorum Translation and Critical Edition*. — réédition de l'ouvrage original daté de 1906, Oxford University Press, Oxford (2013), ISBN : 978-0-19-960795-2, cf. page 42.
151. GOLDBERG, D. E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison-Wesley, Indianapolis, IN (1989), ISBN : 978-0-201-15767-3, cf. page 43.
152. MAHFOUF, M., JAMEI, M., LINKENS, D. A. & TENNER, J. Inverse modelling for optimal metal design using fuzzy specified multi-objective fitness functions, *Control Engineering Practice* **16** (2), 179–191 (2008), cf. page 43.

153. KENNEDY, J. & EBERHART, R. [Particle swarm optimization](#), *Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks, 1942–1948*, Institute of Electrical & Electronics Engineers, New York City, NY (1995), cf. page 44.
154. BOX, G. E. P. & WILSON, K. B. [On the experimental attainment of optimum conditions](#), *Journal of the Royal Statistical Society* **13** (1), 1–45 (1951), cf. page 44.
155. KIRKPATRICK, S., GELATT, C. D. & VECCHI, M. P. [Optimization by Simulated Annealing](#), *Science* **220** (4598), 671–680 (1982), cf. page 44.
156. MAHFOUF, M., CHEN, M. Y. & LINKENS, D. A. [Adaptive Wghted Particle Swarm Optimisation for Multi-objective Optimal Design of Alloy Steels Parallel Problem Solving from Nature](#). *Lecture Notes in Computer Science – Parallel Problem Solving from Nature – PPSN VIII (Eighth International Conference)*, 762–771, Springer-Verlag, Berlin (2004), cf. page 44.
157. DEB, K., PRATAP, A., AGARWAL, S. & MEYARIVAN, T. [A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II](#), *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **6** (2), 182–197 (2002), cf. page 44.
158. CAHON, S., MELAB, N. & TALBI, E.-G. [ParadisEO: A Framework for the Reusable Design of Parallel and Distributed Metaheuristics](#), *Journal of Heuristics* **10** (3), 357–380 (2004), cf. page 44.
159. D’SOUZA, R. G. L., SEKARAN, K. C. & KANDASAMY, A. [Improved NSGA-II Based on a Novel Ranking Scheme](#), *Journal of Computing* **2** (2), 91–95 (2010), cf. page 45.
160. KONAK, A., COIT, D. W. & SMITH, A. E. [Multi-objective optimization using genetic algorithms: A tutorial](#), *Reliability Engineering and System Safety* **91** (9), 992–1007 (2006), cf. page 46.
161. DEB, K. & AGRAWAL, R. B. [Simulated Binary Crossover for Continuous Search Space](#), *Complex Systems* **9**, 115–148 (1995), cf. pages 46, 101.
162. DEB, K. & AGRAWAL, R. B. [Real-coded Genetic Algorithms with Simulated Binary Crossover: Studies on Multimodal and Multiobjective Problems](#), *Complex Systems* **9**, 431–454 (1995), cf. pages 46, 101.
163. DEB, K., SINDHYA, K. & OKABE, T. [Self-adaptive simulated binary crossover for real-parameter optimization](#), *Proceedings of the 9th annual conference on genetic and evolutionary computation – GECCO’07*, 1187–1194 (2007), cf. page 47.
164. ZITZLER, E. & THIELE, L. [Multiobjective evolutionary algorithms: a comparative case study and the strength Pareto approach](#), *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **3** (4), 257–271 (1999), cf. page 47.
165. CORNE, D., KNOWLES, J. D. & OATES, M. [The Pareto envelope-based selection algorithm for multiobjective optimization](#), *Parallel Problem Solving from Nature-PPSN VI*, 839–848 (2000), cf. page 47.
166. REED, P. & DEVIREDDY, V. [Groundwater monitoring design: a case study combining epsilon dominance archiving and automatic parameterization for the NSGA-II](#). *Applications of Multi-Objective Evolutionary Algorithms* 79–100, World Scientific Publishing, Singapore (2004), cf. page 47.
167. LIEFOOGHE, A., JOURDAN, L. & TALBI, E. G. [Metaheuristics and cooperative approaches for the Bi-objective Ring Star Problem](#), *Computers and Operations Research* **37** (6), 1033–1044 (2010), cf. page 47.
168. HAMDY, M., PALONEN, M. & HASAN, A. [Implementation of Pareto-Archive NSGA-II Algorithms To a Nearly-Zero-Energy Building Optimisation Problem](#), *First Building Simulation and Optimization Conference*, 181–188 (2012), cf. page 48.

169. BRANS, J. P. & VINCKE, P. A Preference Ranking Organisation Method: The PROMETHEE Method for Multiple Criteria Decision-Making, *Management Science* **31** (6), 647–656 (1985), cf. page 48.
170. BEHZADIAN, M., KAZEMZADEH, R. B., ALBADVI, A. & AGHDASI, M. PROMETHEE: A comprehensive literature review on methodologies and applications, *European Journal of Operational Research* **200** (1), 198–215 (2010), cf. page 48.
171. BRANS, J. P. & MARESCHAL, B. PROMETHEE Methods. *Multiple Criteria Decision Analysis: State of the Art Surveys*, 163–186, Springer-Verlag, New York (2005), ISBN : 978-0-387-23081-8, cf. pages 48–50.
172. MARESCHAL, B. How to choose the right preference function? En ligne : http://www.promethee-gaia.net/faq-pro/?action=article&cat_id=003002&id=4&lang= (visité le 06/06/2016) (2012), cf. page 49.
173. VENKATA RAO, R. & PATEL, B. K. Decision making in the manufacturing environment using an improved PROMETHEE method, *International Journal of Production Research* **48** (16), 4665–4682 (2010), cf. page 49.
174. MAITY, S. R. & CHAKRABORTY, S. Tool steel material selection using PROMETHEE II method, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology* **78** (9-12), 1537–1547 (2015), cf. page 50.
175. CHATTERJEE, P. & CHAKRABORTY, S. Material selection using preferential ranking methods, *Materials & Design* **35**, 384–393 (2012), cf. page 50.
176. ÇALIŞKAN, H., KURŞUNCU, B., KURBANOĞLU, C. & GÜVEN, S. Y. Material selection for the tool holder working under hard milling conditions using different multi criteria decision making methods, *Materials and Design* **45**, 473–479 (2013), cf. page 50.
177. ANOJKUMAR, L., ILANGKUMARAN, M. & SASIREKHA, V. Comparative analysis of MCDM methods for pipe material selection in sugar industry, *Expert Systems with Applications* **41** (6), 2964–2980 (2014), cf. page 51.
178. PENG, A. H. & XIAO, X. M. Material selection using PROMETHEE combined with analytic network process under hybrid environment, *Materials and Design* **47**, 643–652 (2013), cf. page 51.
179. ZELENY, M. Multiple Criteria Decision Making (MCDM): From Paradigm Lost to Paradigm Regained? *Journal of Multi-Criteria Decision Analysis* **18** (1–2), 77–89 (2011), cf. page 51.
180. COELLO, C. A. C., LAMONT, G. B. & VAN VELDHIJZEN, D. A. *Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems Second Edition*, Springer US, New York (2007), ISBN : 978-0-387-33254-3, cf. pages 51, 100, 101.

Conception de superalliages à base de nickel 3

Dans ce chapitre, la méthode exposée précédemment est exploitée pour la conception de superalliages à base de nickel. Au préalable, les critères de conception portant sur les résistances mécaniques et chimiques ainsi que sur la fabricabilité des superalliages sont explicités. Trois applications sont ensuite détaillées : la première, illustrative, permet de vérifier le bon fonctionnement de la méthode ; la deuxième suit un cahier des charges industriel, l'optimisation étant conduite dans l'espace brevet d'un alliage commercial récent ; enfin, la troisième illustre les pleines possibilités de l'approche proposée, en considérant simultanément un grand nombre de critères d'optimisation. Cette dernière application est complétée d'une étape de sélection assistée par la méthode d'aide à la décision multicritères PROMETHEE. La pertinence des alliages conçus est enfin discutée.

Sommaire

3.1	Introduction	65
3.2	Critères de conception exploitant la thermodynamique prédictive	65
3.2.1	Rôle des éléments d'alliage	66
3.2.2	Origine et influence des phases	67
3.2.3	Les méthodes PHACOMP et NEW PHACOMP	70
3.2.4	Soudabilité des superalliages	71
3.2.5	Forgeabilité des superalliages	75
3.2.6	Protection contre l'oxydation et la corrosion	76
3.3	Critères de conception exploitant la fouille de données	77
3.3.1	Procédures d'apprentissage et de validation des modèles	79
3.3.2	Résistance à la traction et limite d'élasticité	80
3.3.3	Contrainte de rupture par fluage	87
3.3.4	Paramètre de maille de la phase γ	92
3.3.5	Paramètre de maille de la phase γ'	95
3.4	Résumé des critères de conception de superalliages	98
3.5	Adaptation de l'algorithme génétique	99
3.5.1	Multiplés instances	99
3.5.2	Contraintes comme objectifs	100
3.5.3	Paramétrage de l'algorithme	101
3.5.4	Économies d'évaluations	101
3.5.5	Métriques	102
3.6	Optimisation sans aide à la décision : cas illustratif	102
3.6.1	Espace de recherche	103

3.6.2	Objectifs et contraintes	103
3.6.3	Résultats	106
3.7	Optimisation sans aide à la décision : cas industriel	110
3.7.1	Espace de recherche	110
3.7.2	Objectifs et contraintes	110
3.7.3	Résultats	113
3.7.4	Sélection d'alliages pour fabrication	115
3.7.5	Résultats préliminaires de la validation expérimentale	115
3.8	Optimisation avec aide à la décision <i>a posteriori</i>	118
3.8.1	Espace de recherche	118
3.8.2	Objectifs et contraintes	118
3.8.3	Résultats	119
3.8.4	Performances de l'algorithme	123
3.8.5	Sélection multicritères manuelle	125
3.9	Sélection à l'aide de l'analyse décisionnelle multicritères	130
3.9.1	Choix d'une alternative globale	131
3.9.2	Choix d'une alternative orientée vers la résistance au fluage	134
3.10	Analyse de la sensibilité des compositions optimales proposées	138
3.11	Synthèse	140
	Références	140

3.1 Introduction

Développés à partir des années 1930, les superalliages à base de nickel ont été conçus sur la base des alliages nickel-chrome après constatation du caractère renforçant des additions d'aluminium et de titane.¹⁸¹ Depuis, les superalliages jouent un rôle prépondérant dans le secteur aéronautique : utilisés dans les moteurs, ils permettent leur fonctionnement à des températures toujours plus élevées. Parallèlement, leur usage dans les tuyauteries et dans les turbines des centrales thermiques conduit à l'amélioration continue des rendements qui rend possible le respect des nouvelles normes limitant l'émission des gaz à effet de serre.¹⁸² Ces matériaux sont également largement utilisés dans les domaines de la chimie et de la pétrochimie. Toutes ces applications sont caractérisées par des conditions de service sévères avec, entre autres, l'exposition à des chargements mécaniques dans des environnements agressifs : hautes températures, corrosion et oxydation, etc.

Le recours aux superalliages à base de nickel est justifié par leurs caractéristiques à haute température. Ils conservent notamment de bonnes propriétés mécaniques jusqu'à des températures de l'ordre de 75 % de leur température de fusion (~1000 °C). Ils présentent également une excellente résistance à certaines formes de corrosion. Ces propriétés sont largement dues aux très nombreux éléments qui rentrent dans leur composition, chacun contribuant à renforcer leur résistance mécanique ou chimique. Les superalliages commerciaux actuels contiennent ainsi couramment entre huit et douze éléments d'addition (cf. [tableau A.1](#)).

La présente étude se concentre sur le développement de superalliages à base de nickel polycristallins corroyés renforcés par précipitation. Comme leur dénomination l'indique, ces alliages sont :

- polycristallins : leur microstructure est composée de nombreux grains d'orientations diverses séparés par des joints de grains ;
- corroyés, c'est-à-dire qu'ils ne sont pas employés dans un état brut de solidification (post-coulée) mais qu'ils subissent des opérations de mise en forme à haute température qui transforment et améliorent leur microstructure ;
- renforcés par précipitation : leur microstructure est constituée d'une matrice et de phases précipitant lors d'un traitement thermique adapté, qui donnent au matériau une résistance mécanique supérieure à celle de la matrice seule.

La conception de superalliages consiste à trouver une combinaison adéquate d'éléments d'addition ainsi que leur proportion afin de conférer au matériau l'ensemble des propriétés désirées. Dans le cadre de l'optimisation envisagée dans le présent travail, il est nécessaire de traduire ces propriétés en critères rapidement évaluables en utilisant la méthode de calcul des diagrammes de phases ou la régression par processus gaussiens. Ces critères sont détaillés dans les parties suivantes.

3.2 Critères de conception exploitant la thermodynamique prédictive

Les critères thermodynamiques exploités dans cette étude portent sur trois caractéristiques essentielles des superalliages :

- la stabilité de leur microstructure à haute température ;
- leur facilité de mise en œuvre et en particulier leur soudabilité ;
- leur résistance à la corrosion et à l'oxydation.

Ces critères se traduisent par des restrictions sur la nature, la quantité et la composition des phases présentes. Les sections suivantes décrivent ces critères et justifient leur provenance en faisant appel à certains aspects physicochimiques spécifiques aux superalliages à base de nickel.

3.2.1 Rôle des éléments d'alliage

Une des clés du succès des superalliages à base de nickel réside dans la capacité du nickel à accepter des additions de nature variée et dans de grandes proportions. Cette capacité provient notamment de la solubilité dans la matrice de nickel d'un grand nombre d'éléments (tableau 3.1).

TABLEAU 3.1 — Synthèse des solubilités approximatives de divers éléments dans le nickel à 1000 °C. Tableau tiré de la référence 183.

Soluté	Solubilité approximative dans le nickel à 1000 °C (% _{mass.})
Al	7
C	0,2
Co	100
Cr	40
Fe	100
Mn	20
Mo	34
Nb	6
Ta	14
Ti	10
Si	8
W	38

Ces éléments contribuent notamment à accroître la résistance mécanique des superalliages grâce au durcissement par solution solide : les éléments d'addition remplacent les atomes de la phase austénitique ou s'insèrent entre eux, déformant ainsi la maille cristalline et entravant le mouvement des dislocations.

Par ailleurs, lorsque la concentration des éléments d'addition dépasse la limite de solubilité dans l'alliage, des phases secondaires, tels γ' , γ'' et les carbures, précipitent (lors d'un traitement thermique à basse température par exemple). Ces phases peuvent induire un fort durcissement en gênant les mouvements des dislocations. L'origine de ces phases sera détaillée dans la partie suivante.

Les éléments d'addition confèrent aussi aux superalliages leur excellente résistance chimique. En effet, l'oxydation sélective du chrome ou de l'aluminium permet la protection de l'alliage contre la corrosion par la formation d'une couche de passivation (le plus souvent Cr_2O_3 ou Al_2O_3) à sa surface de la même manière que pour les aciers inoxydables. La croissance d'une de ces couches est indispensable à la tenue à long terme des pièces en superalliages.¹⁸⁴

Si des teneurs raisonnables en éléments d'addition sont bénéfiques aux superalliages, tout excès leur est généralement dommageable. L'ajout d'une quantité importante d'éléments entraîne en effet la formation de phases indésirables qui fragilisent le matériau en abaissant sa tenue mécanique ou sa résistance chimique. Par exemple, la précipitation de phases dites « topologiquement compactes » ou phases TCP (*Topologically Close Packed phases*) amoindrit la résistance de la matrice de nickel, notamment en l'appauvrissant en éléments renforçants.¹⁸⁵

Le tableau 3.2 résume les principaux rôles des éléments couramment ajoutés aux superalliages à base de nickel polycristallins corroyés selon qu'ils fournissent un renforcement par solution solide (de la phase de base γ ou de la phase durcissante γ') ou par précipitation (de γ' , de γ'' ou de carbures) et qu'ils participent à la formation d'une couche de protection surfacique. Les éléments responsables de la formation des phases délétères sont également listés.

TABLEAU 3.2 — Principaux rôles des éléments entrant couramment dans la composition de superalliages à base de nickel polycristallins corroyés. Tableau adapté de la référence 183.

Rôle	Éléments
Renforcement par solution solide de γ	Co, Cr, Fe, Mo, W, Ta
Précipitation de γ'	Al, Ti, Nb
Renforcement par solution solide de γ'	Cr, Mo, Nb, Ta, Ti, Si, W
Précipitation de γ''	Nb
Précipitation de carbures	C, Cr, Mo, Nb, Ta, Ti, W
Précipitation de phases délétères	Al, Cr, Fe, Mo, Nb, Si, Ta, Ti, V, Zr
Protection de surface	Al, Cr, Mn, Si

L'origine et l'influence des phases bénéfiques ou délétères communément rencontrées dans les superalliages à base de nickel renforcés par précipitation sont décrites ci-après.

3.2.2 Origine et influence des phases

Les informations suivantes sont principalement issues des travaux de Donachie,⁵¹ Dupont *et al.*,¹⁸³ Reed¹⁸⁵ et Jena & Chaturvedi.¹⁸⁶

3.2.2.1 La phase γ

La phase γ constitue la matrice des superalliages à base de nickel, c'est-à-dire la phase généralement majoritaire au sein de laquelle apparaissent et coexistent les autres phases. Cette matrice a une structure cubique à faces centrées dont le paramètre de maille (la hauteur du cube) est $a_\gamma \simeq 0,36$ nm.

Le cobalt et le fer partagent des rayons atomiques proches du nickel qui, couplés à d'importantes solubilités dans celui-ci, en font des éléments de base secondaires. Le coût d'un superalliage peut être abaissé par la substitution d'une partie du nickel par le fer, élément nettement plus abordable.

Le renforcement par solution solide de la phase γ est assuré par l'ajout de molybdène, de tungstène et de tantale, dont la différence de rayon atomique avec celui du nickel explique la distorsion de la maille austénitique et l'augmentation des propriétés mécaniques au niveau macroscopique. Les coefficients de diffusion faibles de ces éléments en font également des additions sensées dans le cadre d'applications caractérisées par des temps de services longs à haute température : parce qu'ils migrent lentement, ces éléments limitent les déformations à long terme causées par le fluage de l'alliage, ce phénomène faisant le plus souvent intervenir la diffusion.

L'introduction d'éléments en solution solide dans le nickel sera donc recherchée lors des optimisations : le fer pour réduire le coût des alliages et des éléments comme le molybdène et le tungstène pour en améliorer les propriétés thermomécaniques.

À noter également l'action de renforcement par solution solide d'autres éléments tels le chrome, l'aluminium, le titane et le niobium. Cependant, ceux-ci étant généralement exploités pour la formation d'autres phases, leur potentiel de renforcement par solution solide est souvent secondaire dans les superalliages durcis par précipitation.

3.2.2.2 La phase γ'

La phase γ' est un composé intermétallique de type Ni_3Al . Sa maille primitive cubique, de paramètre $a_{\gamma'} \simeq a_{\gamma}$, accueille les atomes d'aluminium sur ses sommets et les atomes de nickel au centre des faces.

Le titane peut remplacer jusqu'à 60 % de l'aluminium dans la phase γ' , qui devient alors de type plus général $\text{Ni}_3(\text{Al}, \text{Ti})$. Un renforcement par solution solide de cette phase est possible *via* la dissolution en son sein de niobium, de molybdène, de tungstène, de cobalt, de chrome et de fer, ces trois derniers se substituant au nickel.

La phase γ' est une phase durcissante, c'est-à-dire qu'elle améliore la résistance mécanique des superalliages en entravant le déplacement des dislocations. Elle sera l'une des phases à rechercher pour obtenir de bonnes propriétés thermomécaniques.

L'efficacité du renfort par précipitation de phase γ' dépend de nombreux paramètres dont sa fraction volumique, la taille et la morphologie des précipités et la distance entre ceux-ci. Ces caractéristiques sont fonction de la composition et de l'historique thermique de l'alliage, incluant son procédé de fabrication et ses traitements thermiques.

Le paramètre de la maille des phases γ et γ' n'est pas strictement identique et varie avec la composition. Il existe une différence de paramètre de maille, ou désaccord paramétrique (*lattice parameter misfit*), δ :

$$\delta = 2 \frac{a_{\gamma'} - a_{\gamma}}{a_{\gamma'} + a_{\gamma}} \quad (3.1)$$

Le désaccord paramétrique renseigne sur la cohérence des phases γ et γ' , cruciale pour la résistance au fluage. Selon la composition des deux phases, cette différence peut atteindre une valeur critique au-delà de laquelle la phase γ' n'est plus cohérente avec la matrice γ , c'est-à-dire qu'elle ne partage plus de relation d'orientation. Dans ce cas, l'action de renfort de la phase γ' perd de son efficacité car la coalescence des précipités s'accélère, ce qui entraîne la diminution de leur nombre par unité de volume.¹⁸⁷ La distorsion des deux mailles par ajout d'éléments en solution solide n'est donc pas anodine.

La composition chimique des phases γ et γ' se doit d'être contrôlée concomitamment pour garantir leur cohérence et conserver une résistance au fluage optimale.

En outre, la phase γ' précipite en phase solide en dessous d'une température dénommée solvus γ' . La connaissance de cette température est un prérequis pour mener à bien le traitement thermique de mise en solution (dissolution) des précipités et les subséquents traitements de précipitation visant à contrôler leur répartition et leur morphologie.

3.2.2.3 La phase η

La tendance à former la phase η de type Ni_3Ti est liée à la teneur en titane, au ratio des additions de titane et d'aluminium et à la composition globale.^{188,189} Si ce ratio est élevé, la phase γ' peut devenir métastable et se dégrader en précipités η faisant leur apparition aux joints de grains, généralement sous la forme de plaquettes ou d'aiguilles. Cette morphologie causerait une perte de ductilité et de résistance mécanique.¹⁸⁸ Certains travaux n'ont toutefois pas pu confirmer ce fait dans le cas de faibles quantités.^{75,190,191}

Il semble néanmoins prudent d'éviter purement et simplement la formation de la phase η compte tenu de ses effets potentiellement néfastes.

3.2.2.4 Les phases γ'' et δ

Lorsque la teneur en niobium d'un superalliage est suffisamment importante, la phase γ'' de type Ni_3Nb est susceptible de se former. L'aluminium et le titane peuvent se substituer au niobium. Tant que la phase γ'' est cohérente avec la matrice (γ), elle est, au même titre que la phase γ' , une source utile de renforcement; cependant, son caractère métastable implique son remplacement progressif par son alter-égo stable, la phase δ , qui est accéléré par l'exposition à de hautes températures (supérieures à $650\text{ }^\circ\text{C}$).¹⁸⁵ La phase δ est une phase indésirable : de structure orthorhombique, elle est incohérente avec la matrice (γ) et entrave moins efficacement le mouvement des dislocations que les phases γ' ou γ'' . La précipitation d'une importante quantité de phase δ conduit donc à une dégradation des propriétés mécaniques.

Certains superalliage sont principalement renforcés par la phase γ'' , le plus populaire étant l'Inconel 718. Dans ce cas, les cinétiques de dégradation de la phase γ'' vers la phase δ sont spécifiquement maîtrisées par ajustement de la composition et des traitements thermiques. Néanmoins, le potentiel de cette phase est ignoré dans le cadre de ce travail visant une stabilité à très long terme, étant par ailleurs avéré qu'elle se transforme progressivement en la phase indésirable δ aux températures ici envisagées.

La conception de nouveaux superalliage visera ainsi à éviter la formation des phases γ'' et δ .

3.2.2.5 Les carbures

L'ajout de carbone aux superalliage conduit à la formation de divers carbures. Leur nature dépend de la composition nominale de l'alliage et de son historique thermique induit par le procédé de fabrication, les traitements thermiques et les conditions de service.

Parmi les carbures pouvant se former se trouvent notamment :

- les carbures de type MC (ou carbonitrides $\text{M}(\text{C}, \text{N})$) avec $\text{M} = \text{Cr}, \text{Mo}, \text{Nb}, \text{Ta}, \text{Ti}, \text{V}$ ou W , qui précipitent dans la matrice et aux joints de grains;
- les carbures de type M_6C avec $\text{M} = \text{Mo}$ ou W , pouvant adopter une morphologie de Widmanstätten néfaste;
- les carbures de type M_{23}C_6 et M_7C_3 , généralement riches en chrome et présents aux joints de grains.

Ces différents carbures peuvent se former au cours de l'élaboration et notamment pendant la solidification, au cours de laquelle le carbone, l'azote et certains éléments carburigènes tendent à ségréger dans le liquide. Cette ségrégation peut engendrer la formation de carbures aux interfaces de solidification (typiquement dans les espaces interdendritiques). Se formant lors de l'élaboration, ces carbures sont dits « primaires ». La formation de carbures en phase solide après un maintien en température (traitement thermique ou service) est également possible, auquel cas ceux-ci sont dits « secondaires ».

La formation de carbures aux joints de grains est bénéfique : répartis sur ces derniers de façon homogène et discontinue, les carbures permettent de les renforcer en restreignant leur glissement qui contribue à la déformation par fluage.

Les carbures de type $M_{23}C_6$ sont les carbures les plus efficaces pour limiter le fluage et les plus stables dans les gammes de températures considérées dans ce travail (700 à 750 °C).¹⁸⁸ Ils seront ainsi prioritairement recherchés.

3.2.2.6 Les phases topologiquement compactes (TCP)

L'excès d'additions dans les superalliages peut provoquer la genèse de phases intermétalliques dures, généralement indésirables, connues pour certaines d'entre elles sous le nom de phases topologiquement compactes (ou phases TCP pour *Topologically Close Packed phases*). Ces phases sont caractérisées par des structures cristallines complexes (possédant jusqu'à plusieurs dizaines d'atomes par maille primitive) qui, ne disposant pas de certains plans de glissement, sont difficilement déformables. Ces phases se créent soit pendant la fabrication par ségrégation à la fin de la solidification, soit après des maintiens en température.

Parmi ces phases se trouvent :^{51,185,188,192}

- la phase σ riche en Cr, Co, Mo, Ni, W et/ou Fe;
- la phase μ riche en Cr, Mo, W, Co, Fe et/ou Ni;
- les phases de Laves riches en Fe, Co, Mo, Nb, Ta et/ou Ti;
- la phase P, possédant une structure proche de celle de la phase σ ¹⁹³;
- la phase R tendant à se former dans des alliages à forte teneur en cobalt¹⁹⁴; sa composition est proche de celle des phases P et σ ¹⁹⁵;
- la phase G riche en Si, Nb, Ti, Ni et/ou Co;
- la phase M riche en Nb, Ni et/ou Al.

À noter que les stœchiométries et les compositions de ces phases peuvent varier largement.¹⁸⁵

La formation de ces phases se fait au détriment de la résistance de l'alliage car :

- elles provoquent un amoindrissement du durcissement par solution solide de la matrice austénitique en l'amputant de certains éléments tels le molybdène et le tungstène;
- elles captent certains éléments (Nb, Ta, Ti) qui contribuent à un durcissement par précipitation efficace;
- elles sont à l'origine de la dégradation de la résistance à l'oxydation par détournement du chrome de la matrice (γ); le chrome consommé ne peut en effet pas diffuser pour former une couche passivante à la surface de l'alliage;
- elles sont dures et accommodent mal les déformations importantes, provoquant une perte de la ductilité qui est pourtant primordiale à la fabrication et à la durée de vie d'un superalliage;
- elles sont fragiles et constituent des sites potentiels d'amorçage de fissures.

Pour ces raisons, de fortes teneurs en TCP (supérieures à quelques pourcents molaires) sont à éviter lors de la conception.

3.2.3 Les méthodes PHACOMP et NEW PHACOMP

Développée parallèlement à l'approche CALPHAD, la méthode PHACOMP (PHASE COMPUTATION, calcul des phases)^{196,197} est un outil de prédiction de certaines phases délétères susceptibles de se former

dans les superalliages à base de nickel. À l'inverse de CALPHAD, cette méthode se base non pas sur des données thermodynamiques, dont peu étaient disponibles à l'époque de sa création, mais sur des paramètres physicochimiques et en particulier les caractéristiques électroniques des phases et des éléments les constituant.

L'approche PHACOMP permet de déterminer la frontière entre le domaine de stabilité de la matrice austénitique (γ) seule et le domaine dans lequel cohabitent la matrice (γ) et des phases TCP (σ , μ , P, Laves) formées lorsque la limite de solubilité des éléments d'alliage dans la matrice est atteinte.¹⁸⁸ À cette fin, PHACOMP définit un nombre de trous d'électrons moyen N_v , égal au produit du nombre de trous des bandes de valence n_v^i des m éléments constituant la matrice et de leur teneur x^i dans celle-ci :

$$N_v = \sum_{i=1}^m n_v^i x^i \quad (3.2)$$

Étant donné que les phases TCP sont composées de métaux de transition dont au moins un possède un caractère électropositif, la propension des superalliages à former des TCP peut être reliée au nombre moyen de trous d'électrons ; plus celui-ci est élevé et plus ces phases indésirables auront tendance à apparaître pour combler ces trous.

Souffrant d'un certain nombre de limitations, la méthode PHACOMP a été supplantée par NEW PHACOMP¹⁹⁸ qui, à la place du nombre moyen de trous d'électrons, considère l'énergie moyenne au-dessus du niveau de Fermi des orbitales d des éléments d'addition, dénommée M_d . Cette grandeur est corrélée à l'électronégativité et au rayon atomique des atomes en solution dans la matrice (γ). Ce changement permet la prise en compte de la température T dans le calcul de la susceptibilité à la formation de phases TCP et l'établissement d'une valeur critique¹⁸³ en dessous de laquelle cette susceptibilité est limitée :

$$M_{d, \text{crit}} = 6,25 \times 10^{-5}(T) + 0,834 \quad (3.3)$$

Quelques applications de la méthode NEW PHACOMP sont détaillées dans l'ouvrage de Sims *et al.*¹⁸⁸ Il est à noter que cette approche ne permet pas toujours de prédire la formation de phases TCP de manière précise et que la méthode CALPHAD offre généralement de meilleurs résultats.²

Néanmoins, ce critère basé sur une valeur limite de M_d sera parfois utilisé dans le présent travail comme l'un des critères de conception d'alliages, en complément de la thermodynamique prédictive.

3.2.4 Soudabilité des superalliages

Le soudage par fusion des superalliages à base de nickel polycristallins corroyés renforcés par précipitation présente plusieurs difficultés. Parmi les principales causes de rupture des joints soudés se trouvent trois types de fissuration : la fissuration de solidification, la fissuration de liquation et la fissuration au réchauffage.¹⁸³ La fissuration des superalliages au soudage peut également être due à une perte de ductilité consécutive à une ségrégation interfaciale d'impuretés comme le soufre.¹⁹⁹ Cependant, cette dernière dépend essentiellement de la présence non-intentionnelle d'éléments traces et ne sera donc pas prise en compte dans le présent travail. Inversement, les trois causes précitées dépendent directement de la teneur en éléments d'addition intentionnels et sont par conséquent susceptibles d'être maîtrisées grâce à une démarche de conception d'alliages.

3.2.4.1 Fissuration de solidification

Le phénomène de fissuration de solidification¹⁸³ se produit lors de la solidification de la zone fondue pendant l'opération de soudage. Alors que le bain de métal fondu se solidifie, trois zones sont distinguables (figure 3.1) :

- une zone uniquement liquide à une extrémité du bain ;
- une zone uniquement solide à l'autre extrémité ;
- une zone intermédiaire composée de liquide et de solide, dite « pâteuse ».

L'intervalle de solidification définit la largeur de la zone intermédiaire : en effet, le liquidus sépare les domaines (liquide) / (liquide + solide) et le solidus — qui est ici un solidus hors d'équilibre; voir ci-après — délimite les domaines (liquide + solide) / (solide). Cette zone intermédiaire constitue le point de départ de la fissuration. Au fur et à mesure que la température baisse et que la solidification progresse, une part de plus en plus importante de solide est formée. En refroidissant, la partie solide génère des contraintes de retrait qui sont notamment répercutées sur la zone (liquide + solide). Deux domaines de comportement de cette zone sont distinguables : si peu de solide s'est formé, la circulation du liquide se fait librement entre les zones solidifiées ; les espaces laissés par les films liquides ouverts par les efforts de retrait sont comblés par le liquide excédentaire : la fissuration ne se produit pas. À l'opposé, la formation de plus en plus de phase solide accroît les contraintes de retrait et tend à entraver le mouvement du liquide, voire à l'empêcher. Des zones liquides peuvent être emprisonnées au sein de domaines solides, auquel cas leur ouverture par les contraintes n'est plus compensée par écoulement (elles ne sont plus « remplies »), provoquant leur décohésion et l'apparition d'une fissure. Celle-ci suit le chemin de rupture la plus facile et se propage le long des films de liquide emprisonné. La susceptibilité à la fissuration de solidification est liée à la largeur de l'intervalle de solidification : plus celui-ci est important et plus le temps pendant lequel la zone solidifiée soumet la zone intermédiaire à des contraintes de retrait est grand, augmentant le risque de rupture.

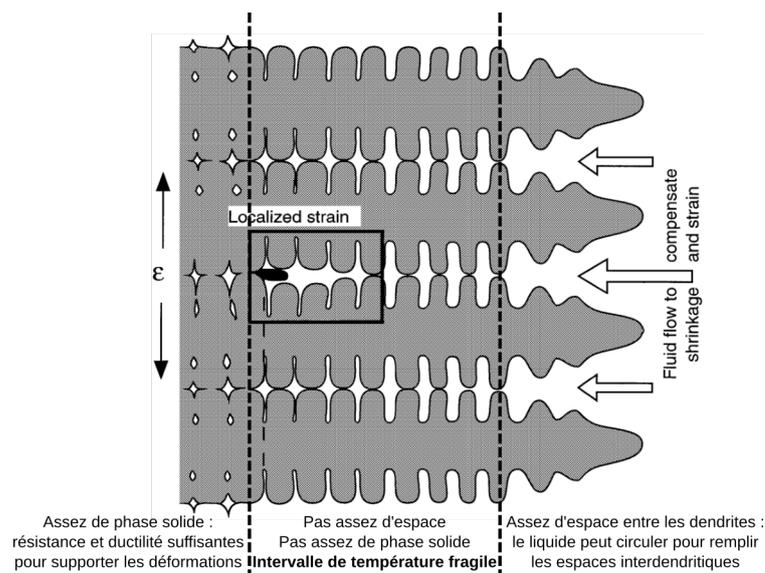


Figure 3.1 — Représentation schématique de la formation d'une fissure à chaud entre des grains colonnaires dendritiques résultant de contraintes de retrait et de la fermeture des canaux interdendritiques. Figure tirée et adaptée de la référence 200.

La susceptibilité à la fissuration de solidification peut être atténuée en réduisant l'intervalle de température dans lequel il est probable que l'amorçage d'une fissure se produise. Cet intervalle est

appelé « intervalle de température de fragilité » ou *Brittle Temperature Range* (BTR).²⁰¹ Il s'agit de la différence entre deux températures. La première représente la température à laquelle peu de liquide (~1 %) demeure dans la zone intermédiaire, c'est-à-dire la température marquant quasiment la fin de la solidification. La deuxième température sépare les deux domaines de comportement de la zone intermédiaire détaillés précédemment (cohésion ou décohésion des films liquides). Ce changement de comportement intervient pour des proportions de liquide de l'ordre de quelques dizaines de pourcents selon la littérature.²⁰¹ La température utilisée dans cette étude correspond à une proportion de liquide résiduel de 20 %.

Le BTR peut être calculé à l'aide d'un outil de thermodynamique prédictive en considérant un modèle de solidification hors équilibre de type Scheil-Gulliver, prenant en compte les effets de la redistribution des éléments entre liquide et solide, conduisant à la microségrégation de solidification. Ce modèle fait l'hypothèse d'une solidification suffisamment rapide pour ignorer toute diffusion dans le solide et d'une diffusion et/ou d'une convection infiniment rapide(s) dans le liquide, qui demeure donc à tout instant homogène. Ces conditions induisent la ségrégation la plus forte et correspondent donc au risque de fissuration maximal. En outre, le modèle de Scheil-Gulliver part du principe que l'équilibre thermodynamique est localement respecté à l'interface entre le liquide et le solide nouvellement formé.

La simulation de ce modèle dans Thermo-Calc est opérée *via* le calcul itératif de l'équilibre thermodynamique depuis une température initiale suffisamment élevée pour que seule la phase liquide existe, jusqu'à une température où celle-ci a complètement disparu (figure 3.2). À chaque étape de la simulation, la température est réduite, l'équilibre entre les phases solide et liquide est calculé et la composition du liquide est modifiée au regard de la nouvelle composition de la phase solide pour tenir compte de la consommation d'éléments servant à la formation de cette dernière. Les phases solides formées sont conservées en mémoire et retirées des calculs ultérieurs, la composition du liquide ainsi adaptée étant ensuite exploitée pour le calcul de l'équilibre à la température suivante.

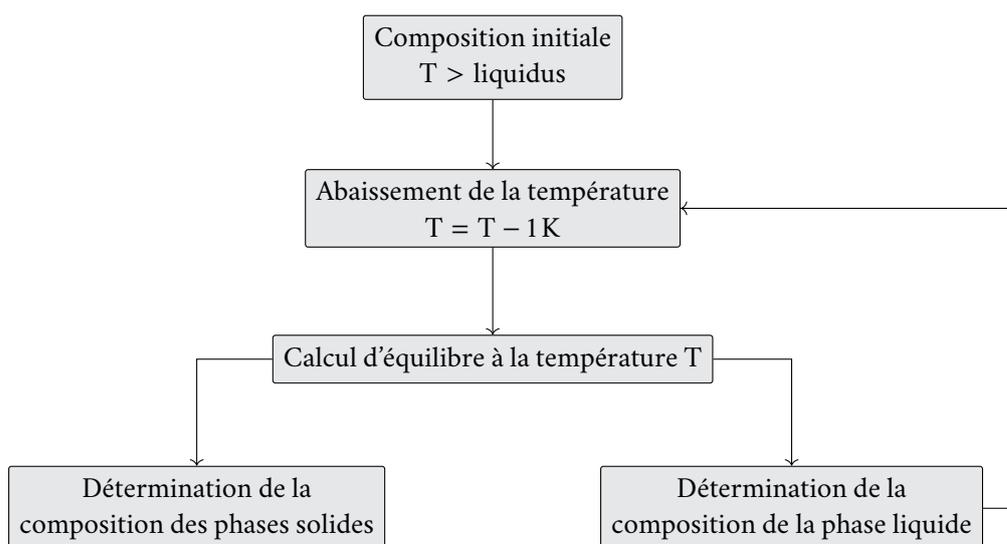


Figure 3.2 — Principe du calcul de l'intervalle de solidification à l'aide de la thermodynamique prédictive.

Cette procédure est répétée tant que demeure 1 % de phase liquide. Les températures correspondant à 1 et 20 % de liquide résiduel sont extraites et leur différence définit le BTR.

En vertu des remarques précédentes, la conception de superalliages soudables nécessitera des BTR faibles.

Le soufre, en plus de sa participation à la ségrégation intergranulaire, agit également sur le BTR; cependant, pour les mêmes raisons que précédemment (il s'agit d'une présence non-intentionnelle) son effet n'est pas gérable dans le cadre de la conception d'alliages, d'autant plus qu'il est absent de la base de données thermodynamiques employée (TTNI8).

3.2.4.2 Fissuration de liquation

La fissuration de liquation est similaire à la fissuration de solidification, en cela qu'elle implique une décohésion le long de films liquides. Elle se produit cependant dans la zone affectée thermiquement des joints soudés (zone non fondue au voisinage de la zone soudée subissant la fusion) lorsque la ségrégation aux joints de grains de certains éléments provoque l'apparition de composés à bas point de fusion.¹⁸³ Au cours de l'opération de soudage, la température de la zone affectée thermiquement est suffisante pour que ces constituants fondent dans les joints de grains et forment des films liquides qui amoindrissent leur résistance. Soumis aux contraintes thermiques issues du soudage (par exemple dues à la succession d'efforts de dilatation et de retrait), les joints de grains rompent, cédant la voie à une fissure intergranulaire. Les principaux éléments intervenant dans ce mécanisme sont le niobium (plus particulièrement des composés riches en niobium tels les carbures NbC ou des phases de Laves), le carbone, le bore, le zirconium et des impuretés comme le soufre.

En matière de conception d'alliages, l'augmentation de la résistance à la fissuration de liquation appelle donc la réduction de la teneur en niobium, en bore et en zirconium, ainsi que la minimisation de la proportion de phases contenant du niobium.

3.2.4.3 Fissuration au réchauffage

La fissuration au réchauffage est une forme de fissuration spécifique aux superalliages à base de nickel renforcés par précipitation de la phase γ' .^{183,202} Elle est aussi dénommée fissuration de relaxation ou fissuration de déformation-vieillessement (*Strain-Age Cracking*, SAC). Ce type de fissuration se développe généralement dans la zone affectée thermiquement lorsque l'alliage est soumis, après un traitement de mise en solution, à un traitement de vieillissement pendant lequel deux mécanismes entrent en action :

- une perte de ductilité dans la zone affectée thermiquement due à la précipitation de la phase durcissante γ' ;
- la relaxation (i) des contraintes résiduelles post-soudage ou (ii) des contraintes liées à la différence de coefficients de dilatation thermique entre le métal de base et le métal de la zone soudée ou (iii) des contraintes provoquées par les déformations dues à la précipitation de la phase γ' .

La perte de ductilité peut être telle que le matériau n'est plus en mesure de supporter les contraintes, qui conduisent alors à une fissuration.

L'augmentation des additions d'aluminium ou de titane, deux formeurs de γ' , conduisent à l'exacerbation de ce phénomène *via* l'accélération des cinétiques de précipitation de cette phase et l'augmentation de sa fraction molaire. La relation entre fissuration au réchauffage et teneur en

éléments formeurs de γ' a notamment été étudiée par Prager & Shira²⁰³ et un diagramme expérimental décrivant la susceptibilité à la fissuration au réchauffage en fonction des additions de ces deux éléments a été proposé (figure 3.3).

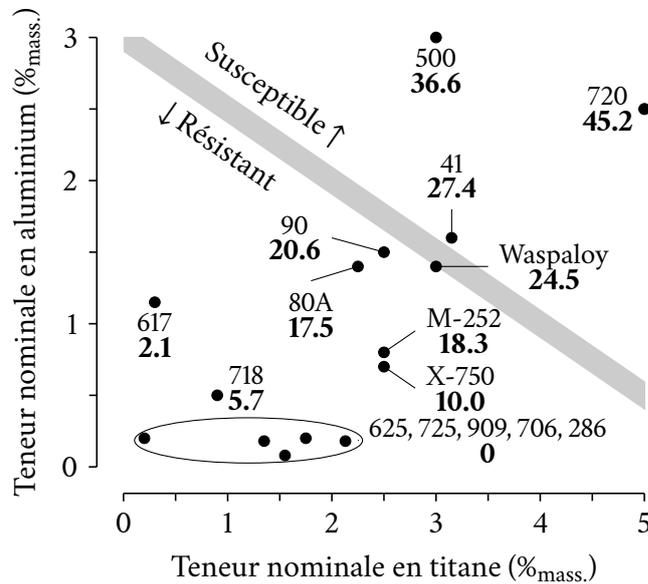


Figure 3.3 — Influence des teneurs nominales en aluminium et en titane sur la susceptibilité à la fissuration au réchauffage pour plusieurs superalliages à base de nickel commerciaux. Les alliages situés sous la bande grise sont aisément soudables tandis que ceux au-dessus présentent un risque de fissuration. Le pourcentage molaire de γ' à 750 °C tel que calculé avec Thermo-Calc et TTNI8 est affiché en gras sous la dénomination des alliages. Cette figure est adaptée des références 203 et 204.

Étant donné la relation physique directe entre la phase γ' et la fissuration au réchauffage, la réduction de la fraction molaire de γ' apparaît sensée. D'après la figure 3.3, une valeur limite de 25 %_{mol}. à 750 °C apparaît acceptable.

Cette phase permettant par ailleurs d'obtenir de bonnes propriétés mécaniques, il ne sera pas souhaitable de l'éliminer complètement et l'on cherchera plutôt des compromis entre résistance et soudabilité.

3.2.5 Forgeabilité des superalliages

Le forgeage est un traitement thermomécanique permettant la mise en forme des superalliages et l'ajustement de leur microstructure. La facilité avec laquelle ceux-ci sont forgés, appelée forgeabilité, est représentative de leur capacité à être déformés sans que des défauts externes ou internes ne soient introduits, et dépend de la ductilité du matériau dans la plage de température de forgeage. Dans le cas des superalliages renforcés par précipitation de γ' , il convient de trouver des paramètres de forgeage adaptés.

La ductilité nécessaire est obtenue en forgeant à des températures supérieures à la température de solvus γ' , au-delà de laquelle les précipités de la phase γ' se dissolvent et leur effet renforçant s'estompe. Cette température de solvus γ' doit donc être atteignable, c'est-à-dire pas trop élevée. De plus, le forgeage étant conduit en phase solide, cette température doit également être inférieure au solidus.

Notons qu'il existe des stratégies de forgeage légèrement en dessous de la température de solvus γ' permettant d'exploiter l'effet d'épinglage des joints de grains de manière à limiter le grossissement des grains; ce principe ne sera pas exploité ici.

3.2.6 Protection contre l'oxydation et la corrosion

La formation d'une couche de passivation continue à la surface des superalliages constitue leur principale protection contre la corrosion et en particulier l'oxydation à haute température. La plupart des superalliages à base de nickel corroyés sont « chromino-formeurs ». Ils se protègent de leur environnement en formant une couche de sesquioxyde de chrome Cr_2O_3 (ou chromine) qui limite, à des températures inférieures à 950°C , la diffusion d'espèces oxydantes et sulfurantes vers le métal ainsi que la diffusion d'éléments d'alliage vers la surface. Au-delà de cette température, la couche se dégrade et il est indispensable de former une couche de sesquioxyde d'aluminium Al_2O_3 (alumine) ou de recourir à des revêtements spéciaux. La protection conférée par la chromine est suffisante étant données les gammes de température d'utilisation envisagées pour les alliages conçus dans ce travail ($700\text{-}750^\circ\text{C}$).

La formation de la couche de Cr_2O_3 s'effectue par oxydation sélective du chrome selon des cinétiques dépendantes de la composition de l'alliage. En particulier, la concentration en éléments réactifs tels le chrome, l'aluminium, le manganèse, le silicium et certains lanthanides (le lanthane et le cérium par exemple) est critique. Il est admis qu'une teneur nominale en chrome d'environ $15\%_{\text{mass}}$ est suffisante pour assurer la formation d'une couche d'oxyde continue,¹⁸⁴ condition indispensable pour une protection adéquate.

Cependant, la composition nominale d'un alliage peut être trompeuse : une partie du chrome d'un superalliage peut dans la pratique former des composés desquels elle peut difficilement se séparer (par exemple des carbures M_{23}C_6 ou des phases TCP). Peu diffusible, ce chrome ne peut pas être oxydé préférentiellement et participer à la création de la couche de passivation. Ce chrome « capturé » amoindrit la quantité de chrome réellement disponible pour la protection contre la corrosion qui dépend à l'inverse du chrome « libre » dissout dans la matrice (γ) et immédiatement disponible pour diffusion. La propension d'un superalliage à résister à l'oxydation est ainsi plus justement estimée par la quantité de chrome libre plutôt que par sa teneur en chrome nominale, d'une manière similaire aux aciers inoxydables.⁷⁰

Si une teneur nominale minimale en chrome de $15\%_{\text{mass}}$ est estimée nécessaire pour la genèse d'une couche de passivation efficace, la fraction atomique minimale de chrome correspondante dans la matrice (γ) n'est pas aussi clairement définie. Cette teneur en chrome libre peut être estimée par la méthode CALPHAD. La figure 3.4 présente les résultats du calcul de la teneur en chrome de la matrice (γ) pour une centaine d'alliages commerciaux (superalliages à base de nickel, superalliages à base de cobalt et aciers inoxydables austénitiques) contenus dans les bases de données servant à la modélisation des propriétés mécaniques (cf. tableau A.1) en utilisant Thermo-Calc et la base de données TTNI8.

La plupart des superalliages chromino-formeurs contiennent entre 15 et $25\%_{\text{mass}}$ de chrome; dans cette gamme se trouvent des alliages commerciaux largement employés tels l'Inconel 718 et le Waspaloy. Y sont également présents des superalliages utilisés, ou dont l'utilisation est envisagée, dans les circuits de vapeur de centrales thermiques : les alliages 230, 263, 282 et 617, possédant tous des teneurs en chrome libre proches de $24\%_{\text{at}}$, voire supérieures.

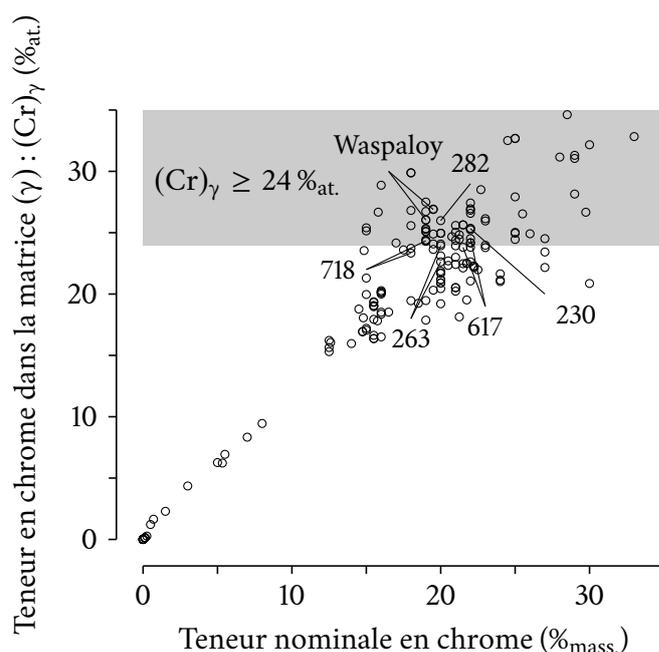


Figure 3.4 — Teneur en chrome de la matrice (γ) à 750 °C, calculée à l'aide de Thermo-Calc et TTNi8, représentée en fonction du pourcentage de chrome nominal pour une centaine de superalliages à base de nickel, superalliages à base de cobalt et aciers inoxydables austénitiques.

Ainsi, il semble qu'une fraction de chrome libre en solution dans la matrice (γ) d'environ 24 %_{at.} soit adéquate pour garantir la protection contre l'oxydation.

3.3 Critères de conception exploitant la fouille de données

L'optimisation de la composition de superalliages à base de nickel est également opérée de façon à améliorer leurs propriétés macroscopiques. Les propriétés d'intérêt, prédites à l'aide de processus gaussiens, sont ici :

- les propriétés mécaniques en traction : la limite d'élasticité R_e et la résistance à la traction R_m . La première quantité représente la contrainte nécessaire pour déformer de manière permanente un matériau, la deuxième quantifie la contrainte au-delà de laquelle celui-ci cède;
- la résistance au fluage, c'est-à-dire aux déformations continues à haute température et à la rupture qui en est la conséquence à terme. Celle-ci est ici évaluée de façon directe, ou indirecte par l'intermédiaire du calcul du désaccord paramétrique entre les phases γ et γ' .

Ces propriétés sont estimées par des modèles de régression non linéaire, les processus gaussiens, dont les paramètres sont ajustés à partir de bases de données contenant les caractéristiques de nombreux alliages commerciaux : superalliages à base de nickel, superalliages à base de cobalt, aciers inoxydables austénitiques et alliages nickel-cuivre. Les données utilisées pour l'apprentissage sont issues des bases employées dans les travaux de Tancret *et al.*¹⁵ concernant les alliages corroyés.

Ces bases de données ont été complétées par l'ajout des propriétés de plusieurs dizaines d'alliages à base de nickel, de cobalt, de fer et de cuivre issues principalement de la littérature technique — fiches des fabricants, données de l'institut du nickel (NiDI), recueils de la société américaine pour les métaux (ASM) — et parfois de la littérature scientifique. La liste complète des alliages inclus dans les bases ainsi que leur provenance sont disponibles en [annexe A](#). Les sections suivantes décrivent la procédure d'apprentissage des modèles et les bases de données employées.

En outre, par rapport aux travaux précédents,¹⁵ les variables relatives aux traitements thermiques ont été supprimées. Les superalliages renforcés par précipitation subissent généralement au moins deux étapes de traitement thermique : un traitement de mise en solution à haute température destiné à « dissoudre » les précipités dans la matrice, suivi d'un traitement de précipitation à plus basse température permettant de régénérer et de faire croître ces précipités tout en contrôlant leur taille et leur morphologie. La prise en compte d'une étape de traitement thermique rajoute au moins deux variables à l'optimisation : la température et le temps de traitement (auquel pourrait s'ajouter la vitesse de refroidissement). Dans le cas des superalliages, il est donc nécessaire de considérer au minimum quatre variables supplémentaires et au maximum huit, quatre traitements thermiques étant possibles — sans compter la vitesse de refroidissement.

Inclure les variables de traitement thermique devrait logiquement, du point de vue métallurgique, permettre d'améliorer la prédiction des propriétés mécaniques, en prenant en compte implicitement l'influence de la microstructure. Cependant, dans le cas des présentes bases de données — décrites ultérieurement — contenant les propriétés d'une centaine d'alliages différents (pour quelques centaines de données au total en considérant différentes températures) et possédant déjà une douzaine de variables de composition, l'ajout de quatre à huit variables supplémentaires complexifie en réalité le processus d'apprentissage des modèles en augmentant le nombre de relations à établir. Une fouille de données efficace requiert en effet que le nombre de variables soit significativement inférieur au nombre de données.

Toutefois, réduire le nombre de variables ne peut se faire arbitrairement, surtout si ces variables sont objectivement pertinentes ; ce devrait logiquement être le cas du traitement thermique qui conditionne la microstructure. Néanmoins, les bases de données sont constituées d'alliages commerciaux, pour lesquels composition et traitement thermique ne sont pas indépendants : pour chaque alliage, le fabricant a recherché le traitement thermique adapté à la composition et procurant les meilleures propriétés mécaniques. Composition et traitement thermique sont donc, pour les alliages des bases de données utilisées ici, intrinsèquement liés ; la microstructure est donc prise en compte de manière implicite et toute prédiction indiquera donc les propriétés mécaniques potentielles qu'il sera possible d'atteindre avec un traitement thermique *ad hoc*.

Une autre raison justifiant la suppression des variables de traitement thermique concerne l'optimisation automatique d'alliages qui sera décrite ultérieurement, en lien avec cette interdépendance implicite entre composition et traitement thermique. En effet, conserver le traitement thermique pourrait conduire l'algorithme à l'optimiser indépendamment de la composition et à proposer un traitement qui serait physiquement incompatible avec cette dernière (par exemple un traitement de précipitation de γ' au-dessus du solvus de cette phase).

En revanche, l'approche retenue supposera qu'il sera possible, pour n'importe quel alliage optimisé, de trouver *a posteriori* le traitement thermique qui conduira aux meilleures propriétés mécaniques qu'il est possible d'en tirer. Ce sont en principe ces propriétés potentielles qui auront été prédites par l'outil de fouille de données. Notons que la recherche du meilleur traitement thermique pourra notamment faire appel à la thermodynamique prédictive.

3.3.1 Procédures d'apprentissage et de validation des modèles

La création des modèles de régression implique la détermination de leurs paramètres à partir des données. À cette fin, la bibliothèque NETLAB¹⁴³ est utilisée. Les données sont normalisées, c'est-à-dire que leur étendue est ramenée dans l'intervalle [0; 1]. Cette normalisation permet de passer outre les effets d'échelle (par exemple pour éviter que l'algorithme d'apprentissage, pour des raisons purement numériques, identifie que la température, variant de 20 à 1300 °C, a une plus grande influence que la teneur en carbone variant de 0 à 0,2 %_{mass.}).

La capacité de généralisation des processus gaussiens à des compositions inconnues (qui ne sont pas présentes dans les bases) est vérifiée selon une opération dénommée « validation croisée deux fois » (*two-fold cross validation*). La validation croisée deux fois consiste en :

- la séparation aléatoire de la base de données en deux ensembles : un ensemble d'apprentissage et un ensemble d'essai ;
- la détermination des paramètres du processus gaussien modélisant les données du premier ensemble ;
- l'interpolation des données de l'ensemble d'essai par le modèle précédemment créé. Le modèle fournit alors des prédictions pour des données auxquelles celui-ci n'avait pas accès lors de l'étape d'apprentissage ;
- le calcul de certaines métriques qui estiment la performance du modèle en fonction de la différence entre valeurs prédites et valeurs réelles ;
- la répétition de ces étapes après avoir interverti l'ensemble d'apprentissage et l'ensemble d'essai.

Cette forme de validation est dite « croisée » de par l'interversion et « deux fois » parce que deux ensembles sont utilisés. Afin de s'assurer de la reproductibilité des résultats, cette validation croisée est répétée dix fois (la base de données étant à chaque fois séparée en deux de manière aléatoire).

Trois métriques sont calculées pour juger de la qualité d'un modèle :

- la valeur absolue des écarts (ou erreur absolue moyenne, *Mean Absolute Error*, MAE) ;
- l'erreur absolue moyenne en pourcentage (*Mean Absolute Percentage Error*, MAPE) ;
- l'erreur-type (*Root-Mean-Square Error*, RMSE).

Ces métriques reposent sur le calcul de l'erreur e_i entre une valeur prédite y_i^* et la valeur « cible » (mesurée, réelle) y_i :

$$e_i = y_i^* - y_i \quad (3.4)$$

L'erreur absolue moyenne représente la somme de la valeur absolue de toutes les erreurs moyennées par leur nombre N ; l'unité est donc la même que celle de la grandeur prédite :

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |e_i| \quad (3.5)$$

L'erreur absolue moyenne en pourcentage est la somme moyennée des pourcentages d'erreur absolue entre les prédictions et les cibles :

$$\text{MAPE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{e_i}{y_i} \right| \times 100 \quad (3.6)$$

L'erreur-type est la racine-carrée de l'erreur quadratique (*Mean Square Error*, MSE); celle-ci est similaire à la MAE en remplaçant la valeur absolue par le carré :

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i^2 \quad (3.7)$$

D'où :

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i^2} \quad (3.8)$$

Ces trois quantités fournissent des informations différentes mais, de manière générale, moins elles sont élevées et meilleure est la performance du modèle. Leur valeur sera discutée par la suite.

3.3.2 Résistance à la traction et limite d'élasticité

3.3.2.1 Détails des bases de données

Les bases de données servant à la prédiction de la résistance à la traction R_m et de la limite d'élasticité R_e contiennent respectivement 1960 et 1928 mesures évaluées sur 237 alliages et possèdent quatorze variables : douze éléments d'alliages, la température à laquelle la propriété a été mesurée et ladite propriété. Les bornes, la moyenne et l'écart-type de ces variables sont listés dans le [tableau 3.3](#). Le nickel, élément de base, n'est pas présent dans les bases de données car il dépend linéairement de la teneur en éléments d'addition :

$$\%_{\text{mass.}}(\text{Ni}) = 100 - \%_{\text{mass.}}(\text{Cr} + \text{Co} + \text{Mo} + \text{W} + \text{Nb} + \text{Al} + \text{Ti} + \text{Fe} + \text{Mn} + \text{Si} + \text{C} + \text{Cu}) \quad (3.9)$$

TABLEAU 3.3 — Variables des bases de données de la résistance à la traction et de la limite d'élasticité.

	Cr	Co	Mo	W	Nb	Al	Ti	Fe	Mn	Si	C	Cu	T	R_m	R_e
Unité	% _{mass.}												°C	MPa	
Minimum	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	20	13	8
Maximum	33	58	28,5	15	6,5	5,5	5	66,8	1,5	2,8	1	66	1316	1580	1310
Moyenne	18,2	7,2	4,9	0,9	0,6	0,8	1,0	12,6	0,4	0,3	0,1	1,3	538	678	419
Écart-type	6,7	11,1	5,5	2,9	1,4	1,1	1,2	16,9	0,4	0,5	0,1	6,4	322	354	279

La répartition des données dans l'espace des compositions est visualisable sur la [figure 3.5](#), y compris pour le nickel. Les compositions contenues dans la base de données couvrent des gammes de teneurs communément retrouvées dans les superalliages à base de nickel polycristallins corroyés.

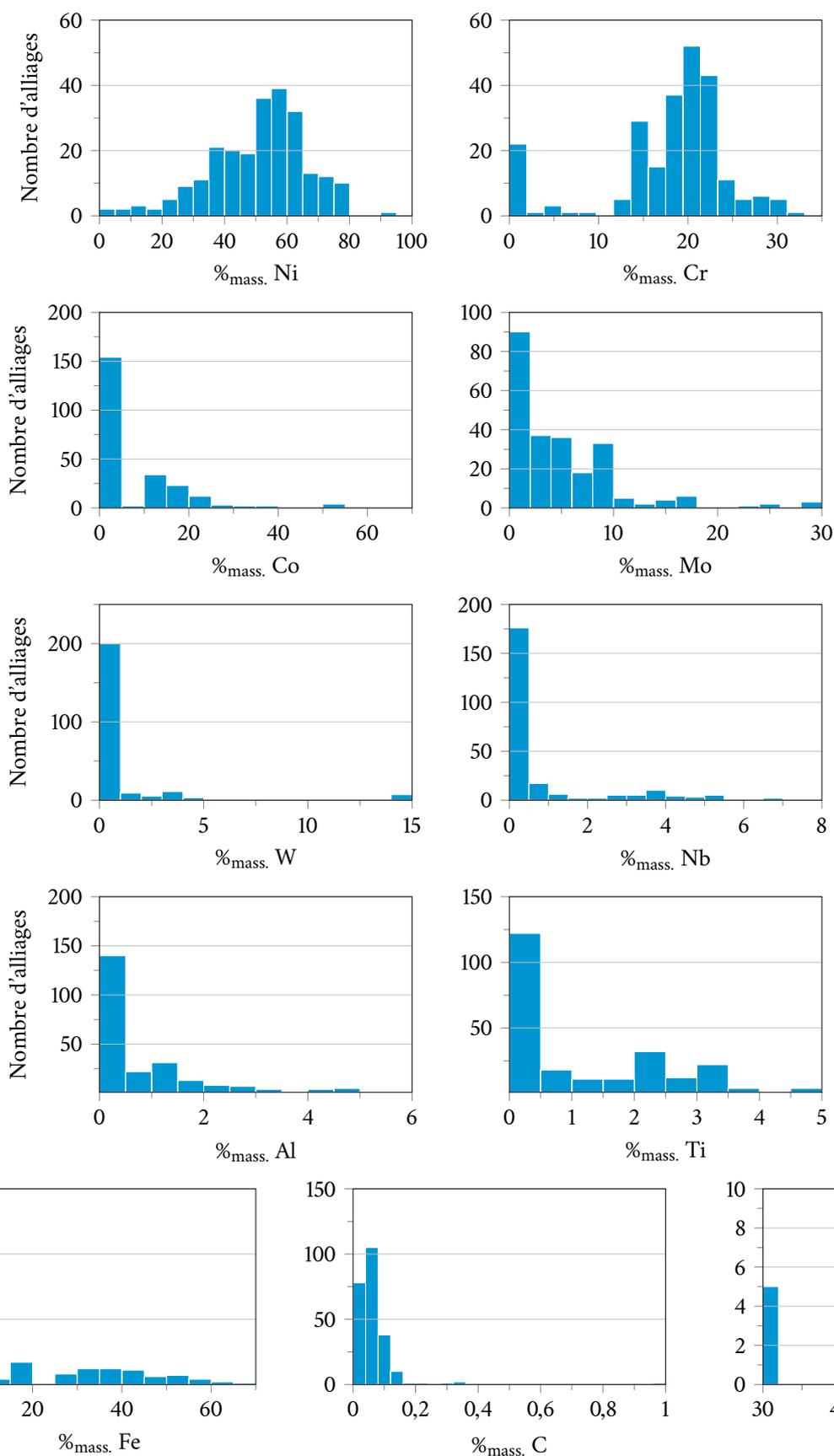


Figure 3.5 — Histogrammes montrant la répartition, dans l'espace des compositions, des alliages des bases de données de la résistance à la traction et de la limite d'élasticité.

Toutes les valeurs de résistance à la traction et de limite d'élasticité sont relativement bien représentées et ont été mesurées sur une large plage de température (figure 3.6).

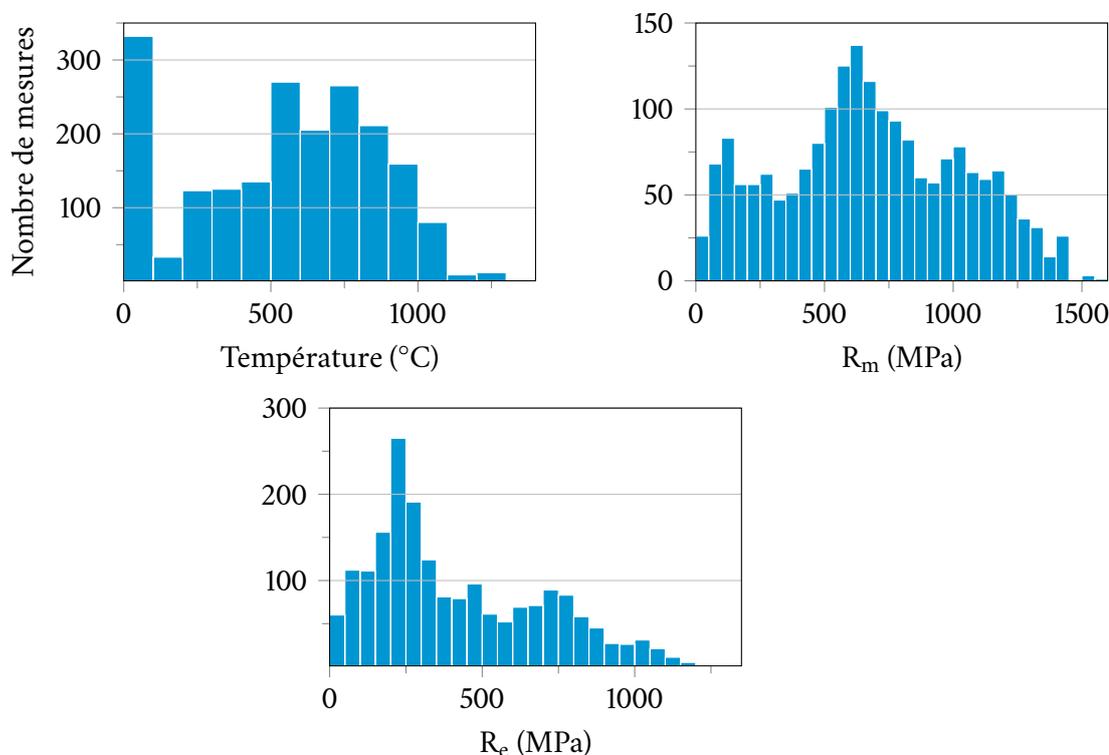


Figure 3.6 — Histogrammes montrant la répartition dans les bases de données de la température et des mesures de résistance à la traction et de limite d'élasticité.

3.3.2.2 Validation croisée

Résistance à la traction Le processus de validation décrit précédemment est appliqué dix fois. Les métriques sont calculées pour chaque « pli » (*fold*) de chaque validation croisée et sur chaque ensemble caractérisé par sa moyenne et sa variance (le carré de l'écart-type). Le tableau 3.4 résume leurs valeurs. La colonne # y liste les résultats d'une validation croisée; chaque sous-ligne représente les résultats d'un pli selon que la qualité du modèle est vérifiée sur l'ensemble qui a servi à son apprentissage ou sur l'ensemble dédié au test. Les erreurs sont évidemment moins élevées sur les ensembles d'apprentissage que sur ceux d'essai mais demeurent raisonnables même sur ces derniers : ainsi la MAE ne dépasse pas 50 MPa, la MAPE est en moyenne inférieure à 10 % et l'écart-type minimal (RMSE) des prédictions vaut en moyenne 4 %. Ces erreurs faibles sur les prédictions de l'ensemble d'essai indiquent une bonne capacité de généralisation.

Il est aussi possible de vérifier les résultats de la validation croisée visuellement en représentant les valeurs prédites par le modèle en fonction des valeurs mesurées. Un modèle performant doit fournir des prédictions proches des valeurs réelles, ce qui se traduit sur le graphe par un regroupement des points sur une ligne droite (figure 3.7). Un nombre limité de points (inférieur à 10 %) de l'ensemble d'essai dévie de cette droite, ce qui démontre l'adéquation de l'apprentissage.

La figure 3.8 adopte la même représentation que la figure précédente, excepté que l'écart-type a été retranché des valeurs prédites. Dans une optique de conception « robuste », le recours à cette estimation pessimiste (dénommée $R_m^{-1\sigma}$) est pertinent car il permet de minimiser le risque qu'une prédiction soit surévaluée et ne se réalise pas. Il est intéressant de constater que, dans le cas de

TABLEAU 3.4 — Erreurs d'essai et d'apprentissage pour le modèle appris à partir de la base de données de la résistance à la traction.

#	Set d'essai normalisé		MAE (MPa)		MAPE (%)		RMSE (MPa)	
	Moyenne	Variance	Essai	Apprentissage	Essai	Apprentissage	Essai	Apprentissage
1	0,422	0,051	41,7	23,4	9,4	5,1	63,8	32,8
	0,426	0,051	44,5	28,9	9,5	6,3	65,7	41,6
2	0,428	0,049	40,4	25,7	8,9	5,9	61,1	36,6
	0,420	0,053	42,9	23,1	10,5	4,9	64,2	33,0
3	0,426	0,051	43,0	24,4	9,8	5,4	69,2	34,7
	0,422	0,051	42,2	21,5	10,7	4,7	64,7	30,0
4	0,427	0,053	41,2	30,5	9,6	6,6	58,7	43,2
	0,421	0,049	43,6	28,3	9,5	6,3	64,4	40,2
5	0,425	0,053	40,6	23,8	9,8	5,4	58,5	34,3
	0,423	0,049	43,6	29,5	9,8	6,3	63,1	41,9
6	0,430	0,052	41,6	23,3	8,9	5,5	63,9	32,3
	0,418	0,050	43,2	25,6	10,1	5,4	66,3	36,2
7	0,427	0,051	41,5	22,9	11,5	5,0	62,1	31,8
	0,421	0,051	42,6	28,4	9,1	6,0	65,7	40,5
8	0,427	0,051	45,9	22,8	12,1	5,0	77,0	32,8
	0,422	0,051	39,4	25,5	8,9	5,5	57,6	37,1
9	0,420	0,051	44,2	24,7	10,2	5,2	68,9	34,5
	0,429	0,051	41,7	23,7	9,4	5,6	64,2	33,7
10	0,424	0,052	42,7	26,4	11,4	6,0	63,0	39,3
	0,424	0,050	44,4	25,3	9,4	5,7	66,4	36,0
Moyenne	0,424	0,051	42,6	25,4	9,9	5,6	64,4	36,1

l'ensemble d'essai, 729 points sur 980 sont en dessous de la droite, c'est-à-dire que la prédiction ainsi « réduite » $R_m^{-1\sigma}$ est sous-estimée dans 74 % des cas.

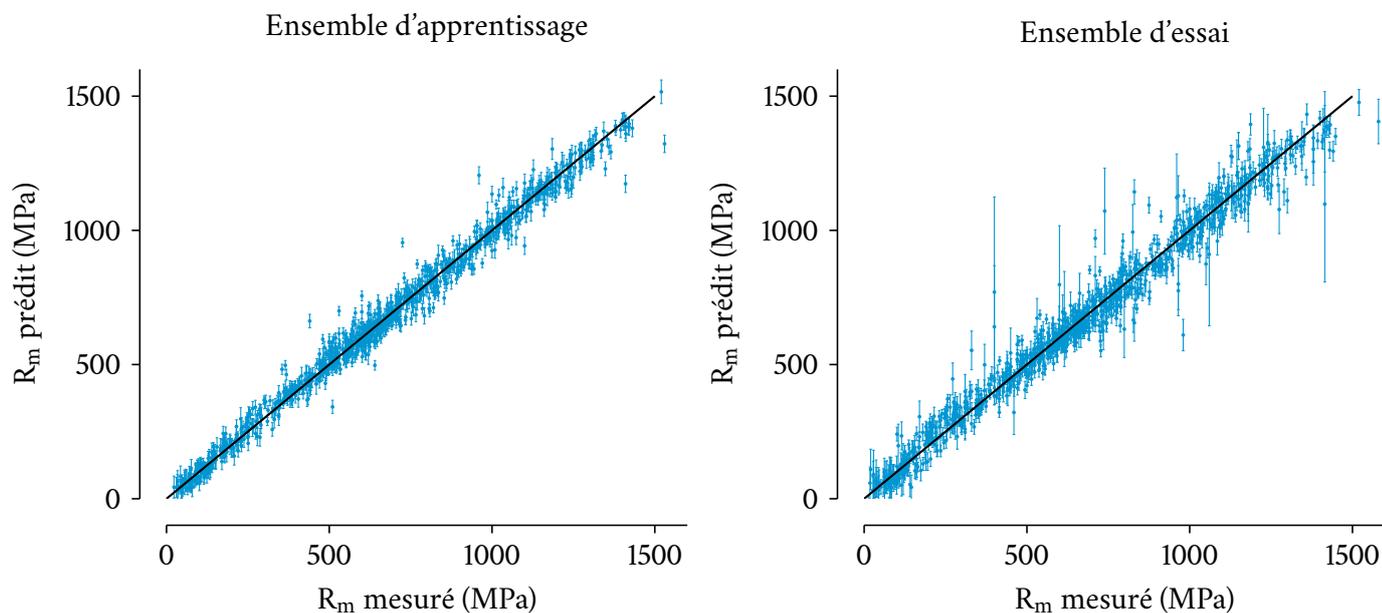


Figure 3.7 — Valeurs prédites par le modèle en fonction des valeurs mesurées de la base de données de la résistance à la traction ; à gauche sur l'ensemble d'apprentissage ; à droite sur l'ensemble d'essai.

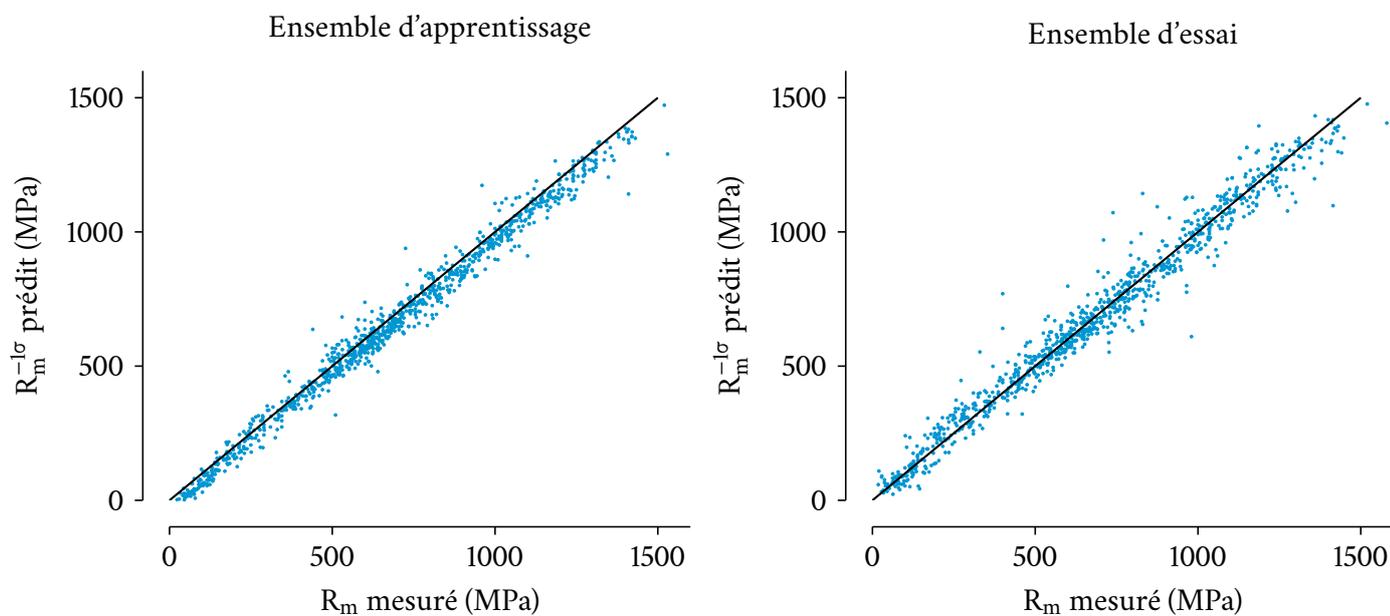


Figure 3.8 — Valeurs prédites par le modèle moins un écart-type en fonction des valeurs mesurées de la base de données de la résistance à la traction ; à gauche sur l'ensemble d'apprentissage ; à droite sur l'ensemble d'essai. Sur ce dernier, 729 points sur 980 sont en dessous de la droite, indiquant que la prédiction réduite d'un écart-type est sous-évaluée dans 74 % des cas.

TABLEAU 3.5 — Erreurs d'essai et d'apprentissage pour le modèle appris à partir de la base de données de la limite d'élasticité.

#	Set d'essai normalisé		MAE (MPa)		MAPE (%)		RMSE (MPa)	
	Moyenne	Variance	Essai	Apprentissage	Essai	Apprentissage	Essai	Apprentissage
1	0,321	0,047	36,4	23,5	14,6	9,5	55,6	33,6
	0,310	0,044	38,8	22,9	15,7	8,1	57,6	32,8
2	0,325	0,047	38,3	19,3	14,0	7,4	58,4	27,8
	0,306	0,044	40,7	26,0	17,0	9,2	60,2	36,4
3	0,316	0,047	39,7	25,7	16,9	9,4	59,0	36,0
	0,315	0,044	40,6	24,1	15,9	9,2	61,9	33,4
4	0,311	0,046	40,2	24,5	16,3	8,8	60,4	35,1
	0,320	0,046	38,9	22,1	15,0	8,6	60,4	31,8
5	0,323	0,048	40,8	19,8	18,2	7,3	61,4	27,9
	0,308	0,043	39,7	25,3	14,0	9,1	59,7	35,9
6	0,311	0,046	39,6	25,0	15,7	8,6	59,6	35,1
	0,320	0,046	40,3	22,6	17,2	8,4	60,7	31,7
7	0,312	0,045	39,1	22,6	15,5	7,9	59,2	31,5
	0,319	0,046	41,0	24,3	16,1	8,9	60,7	34,9
8	0,324	0,047	41,1	20,9	15,6	7,9	61,8	29,8
	0,307	0,044	37,8	24,4	14,6	8,9	59,1	34,2
9	0,319	0,046	40,6	23,1	15,4	8,5	62,3	32,6
	0,311	0,045	39,7	20,2	18,0	7,5	59,3	29,0
10	0,317	0,045	38,9	21,4	16,4	7,9	57,7	30,3
	0,314	0,046	40,8	25,3	14,5	9,3	62,9	36,4
Moyenne	0,315	0,046	39,7	23,1	15,8	8,5	59,9	32,8

Limite d'élasticité Les validations croisées des modèles de limite d'élasticité sont présentées selon le même format que précédemment (tableau 3.5) : les erreurs sont relativement faibles, ce qui tend à confirmer la capacité de généralisation correcte des processus gaussiens entraînés sur cette base.

La figure 3.9 illustre les précédents propos. Une faible déviation est observée entre données réelles et prédictions ; le nombre de points divergents demeure limité.

La figure 3.10 montre que la prédiction réduite d'un écart-type sous-évalue la limite d'élasticité dans 76 % des cas.

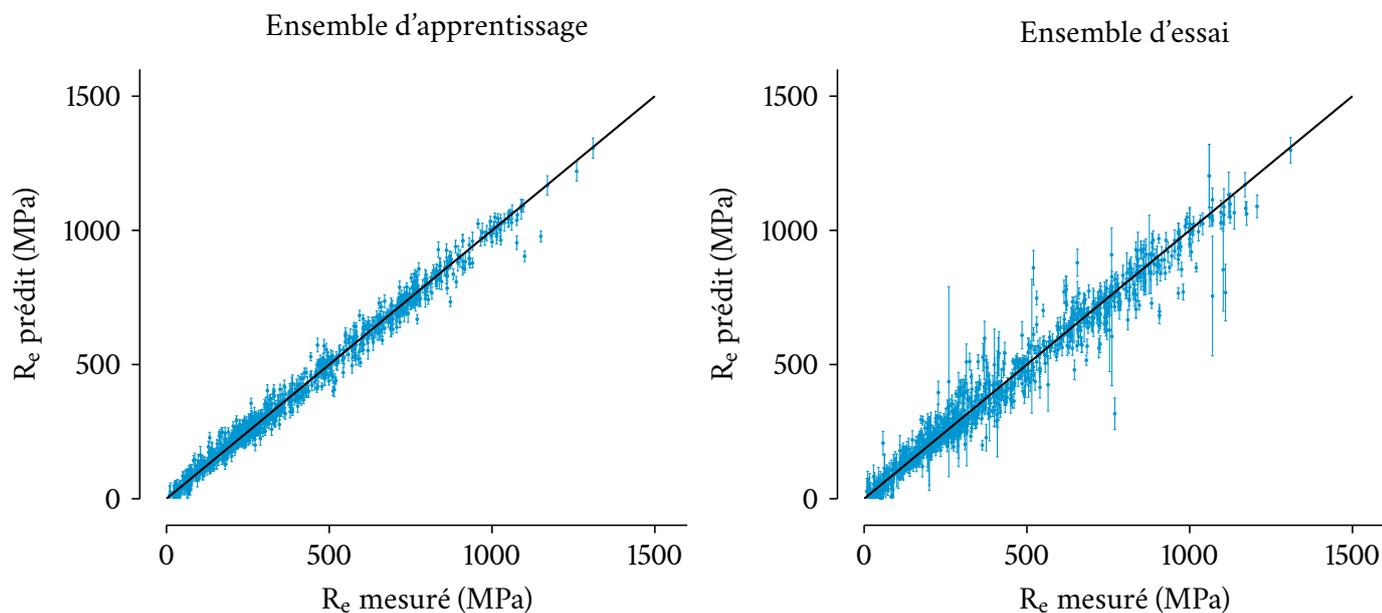


Figure 3.9 — Valeurs prédites par le modèle en fonction des valeurs mesurées de la base de données de la limite d'élasticité; à gauche sur l'ensemble d'apprentissage; à droite sur l'ensemble d'essai.

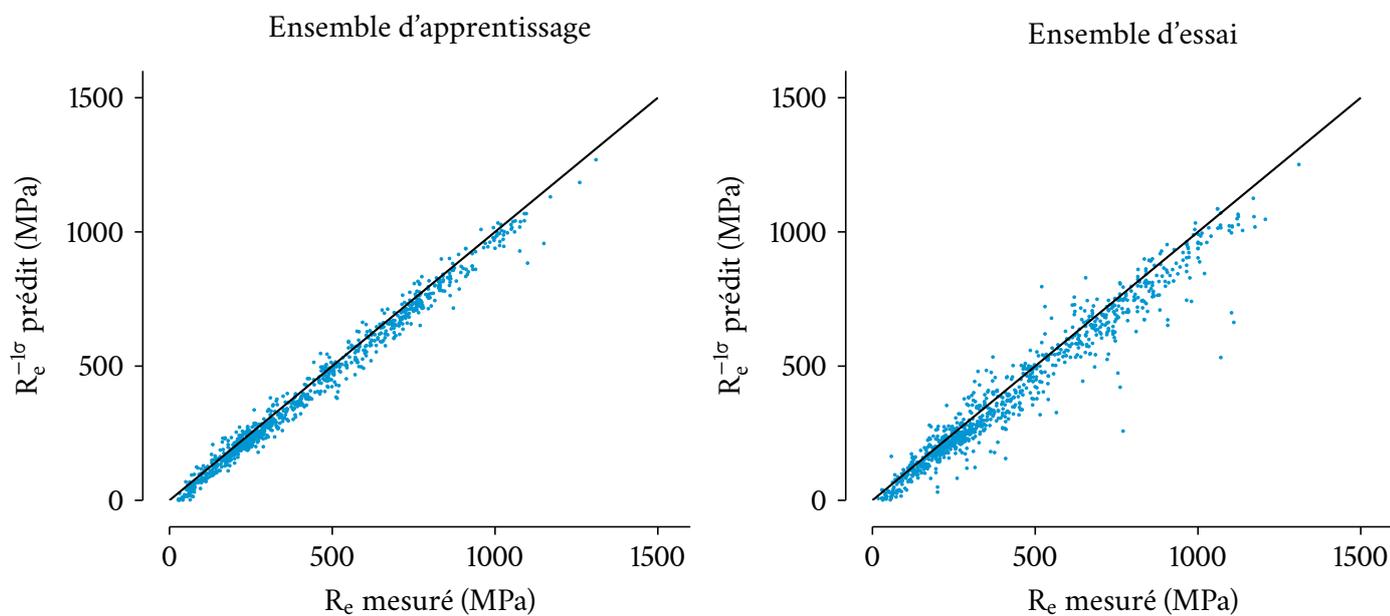


Figure 3.10 — Valeurs prédites par le modèle moins un écart-type en fonction des valeurs mesurées de la base de données de la limite d'élasticité; à gauche sur l'ensemble d'apprentissage; à droite sur l'ensemble d'essai. Sur ce dernier, 737 points sur 964 sont en dessous de la droite, indiquant que la prédiction réduite d'un écart-type est sous-évaluée dans 76 % des cas.

3.3.3 Contrainte de rupture par fluage

3.3.3.1 Détails de la base de données

La contrainte de rupture par fluage (CRF) est la contrainte initiale nécessaire pour assurer la rupture d'un matériau à une température et en un temps donnés. La base de données comporte 1964 entrées et contient, pour 186 alliages, les teneurs en onze éléments d'addition, le temps et la température auxquels intervient la rupture et la contrainte elle-même; leur étendue et leur répartition sont résumées dans le [tableau 3.6](#) et illustrées sur les figures 3.11 et 3.12. Ici encore, les gammes de teneurs couvertes sont larges.

TABLEAU 3.6 — Variables de la base de données de la contrainte de rupture par fluage.

	Cr	Co	Mo	W	Nb	Al	Ti	Fe	Mn	Si	C	t	T	CRF
Unité						% _{mass.}					log ₁₀ h	°C	log ₁₀ MPa	
Minimum	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0,4	538	0,3010
Maximum	30	51,7	25	15	5,2	5	5	57,8	1,5	2,8	0,4	5	1149	3,0689
Moyenne	18,8	9,9	4,7	1	0,5	1,3	1,4	9,1	0,3	0,4	0,1	2,6	814,6	2,0698
Écart-type	3,9	10,8	4,6	3,3	1,2	1,6	1,4	15	0,4	0,6	0,0	0,8	125,2	0,5295

Les essais dont sont issues les mesures ont été conduits majoritairement à des températures comprises entre 600 et 1000 °C et à des temps compris entre 10 et 1000 h, même si quelques données existent pour des durées supérieures ou égales à 10 000 h ([figure 3.11](#)).

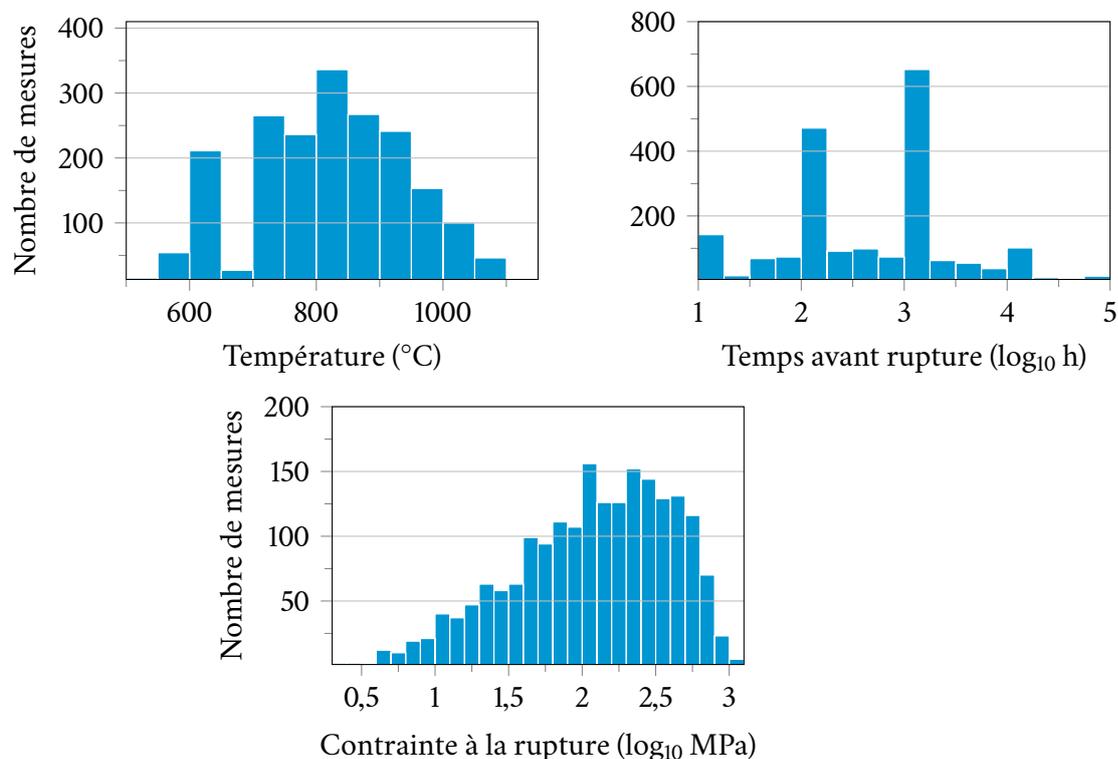


Figure 3.11 — Histogrammes montrant la répartition dans la base de données des mesures de la contrainte de rupture par fluage, ainsi que du temps et de la température auxquels la rupture survient.

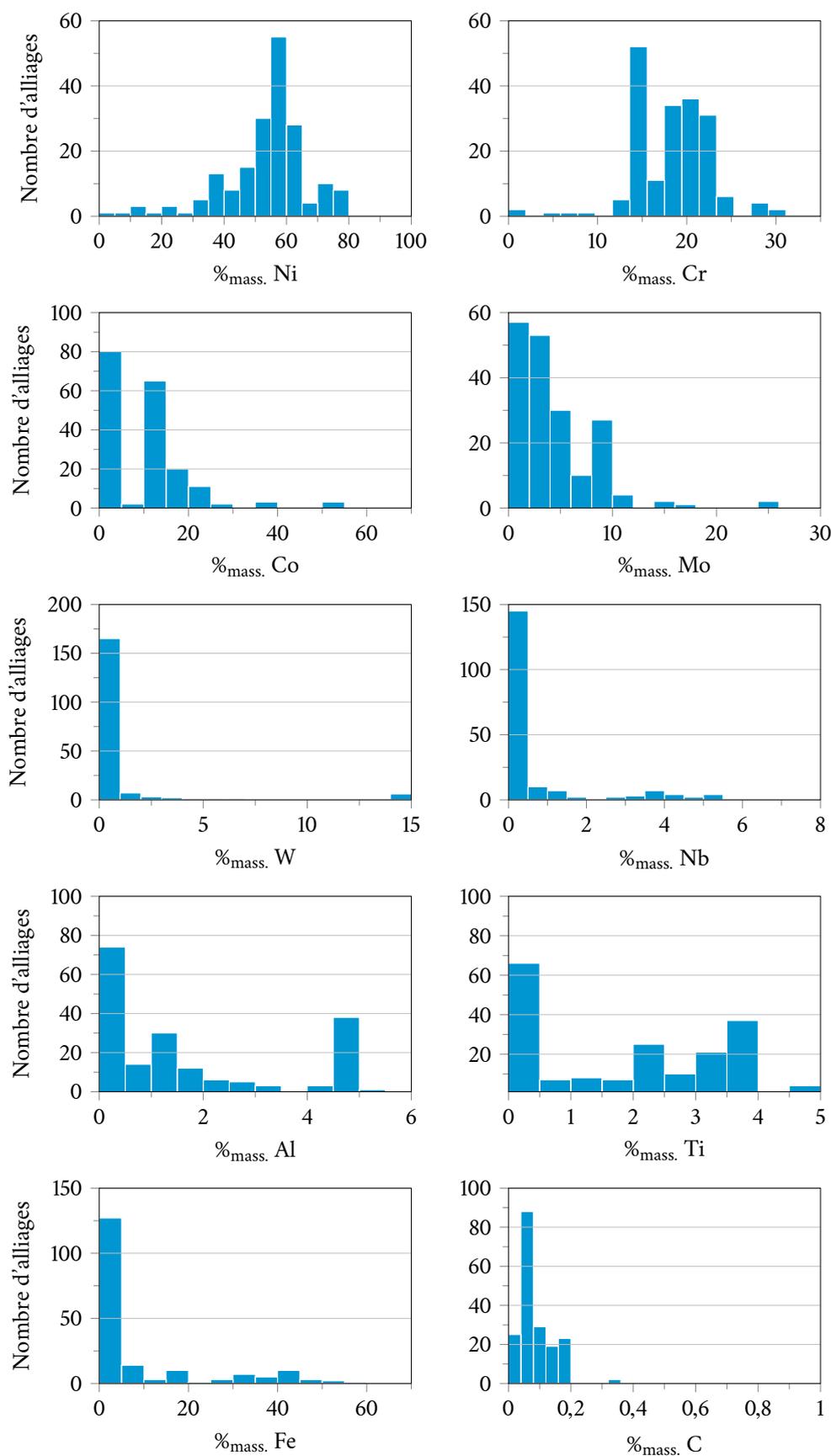


Figure 3.12 — Histogrammes montrant la répartition, dans l'espace des compositions, des alliages de la base de données de la contrainte de rupture par fluage.

Le temps et la contrainte sont exprimés en \log_{10} h et \log_{10} MPa respectivement, de façon à uniformiser la distribution de leurs valeurs (figure 3.11) et à simplifier la régression au vu de la dépendance quasi-linéaire entre le logarithme de la contrainte, la température et le logarithme du temps, mise en évidence par la représentation de Larson-Miller (figure 3.13).

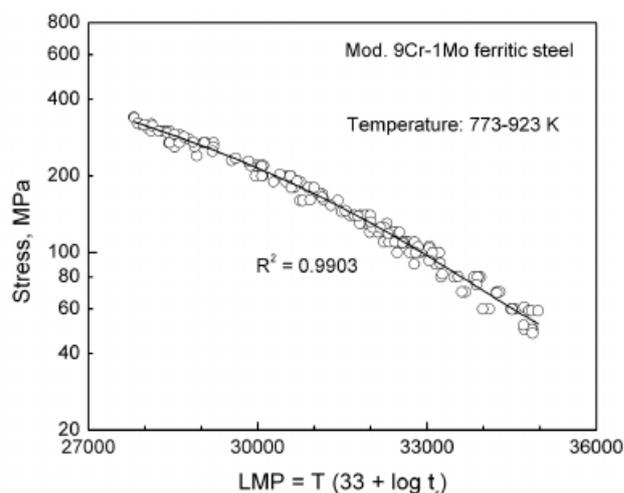


Figure 3.13 — Évolution typique (ici illustrée pour un acier) de la contrainte de rupture en fonction du paramètre de Larson-Miller LMP, combinaison linéaire de la température et du logarithme du temps avant rupture. Figure tirée de la référence 205.

3.3.3.2 Validation croisée

L'apprentissage du modèle de contrainte de rupture par fluage étant conduit sur le logarithme de cette dernière, les erreurs du tableau 3.7 sont donc exprimées en \log_{10} MPa (ou pourcentage de \log_{10} MPa). La MAE de 0,034 \log_{10} MPa correspond par exemple à un écart de ± 24 MPa sur une prédiction de 300 MPa; la MAPE de 2 % par un écart de ± 34 MPa sur la même prédiction; la RMSE de 0,056 par un écart de ± 36 MPa. Ces erreurs, de l'ordre de 10 %, traduisent une capacité de généralisation satisfaisante.

L'adéquation entre données attendues et données prédites est illustrée sur la figure 3.14. La valeur réduite $CRF^{-1\sigma}$ suit la même tendance que les précédentes propriétés mécaniques : sur la figure 3.15, 72 % des prédictions sont sous-estimées.

TABLEAU 3.7 — Erreurs d'essai et d'apprentissage pour le modèle appris à partir de la base de données de la contrainte de rupture par fluage.

#	Set d'essai normalisé		MAE (log ₁₀ MPa)		MAPE (%)		RMSE (log ₁₀ MPa)	
	Moyenne	Variance	Essai	Apprentissage	Essai	Apprentissage	Essai	Apprentissage
1	0,636	0,034	0,031	0,016	1,8	1,0	0,048	0,023
	0,642	0,039	0,035	0,016	2,1	0,9	0,056	0,023
2	0,640	0,035	0,034	0,020	1,9	1,2	0,052	0,029
	0,638	0,038	0,035	0,015	2,0	0,8	0,057	0,020
3	0,634	0,038	0,036	0,017	2,1	1,0	0,061	0,024
	0,645	0,035	0,031	0,017	1,9	1,0	0,048	0,024
4	0,643	0,036	0,034	0,017	1,9	1,0	0,054	0,024
	0,635	0,037	0,031	0,016	1,8	0,9	0,048	0,021
5	0,644	0,035	0,036	0,018	2,0	1,1	0,060	0,026
	0,634	0,038	0,034	0,016	2,1	0,9	0,055	0,021
6	0,636	0,036	0,037	0,016	2,1	0,9	0,069	0,022
	0,642	0,037	0,033	0,015	2,0	0,9	0,051	0,021
7	0,634	0,036	0,035	0,016	2,1	0,9	0,058	0,022
	0,644	0,037	0,034	0,015	1,9	0,8	0,058	0,020
8	0,640	0,038	0,035	0,017	2,1	1,0	0,064	0,024
	0,638	0,036	0,034	0,017	2,0	1,0	0,052	0,024
9	0,637	0,036	0,034	0,015	2,0	0,9	0,056	0,021
	0,641	0,037	0,032	0,017	1,9	1,0	0,048	0,024
10	0,643	0,036	0,038	0,021	2,2	1,2	0,062	0,030
	0,635	0,037	0,033	0,015	2,0	0,8	0,052	0,021
Moyenne	0,639	0,037	0,034	0,017	2,0	1,0	0,056	0,023

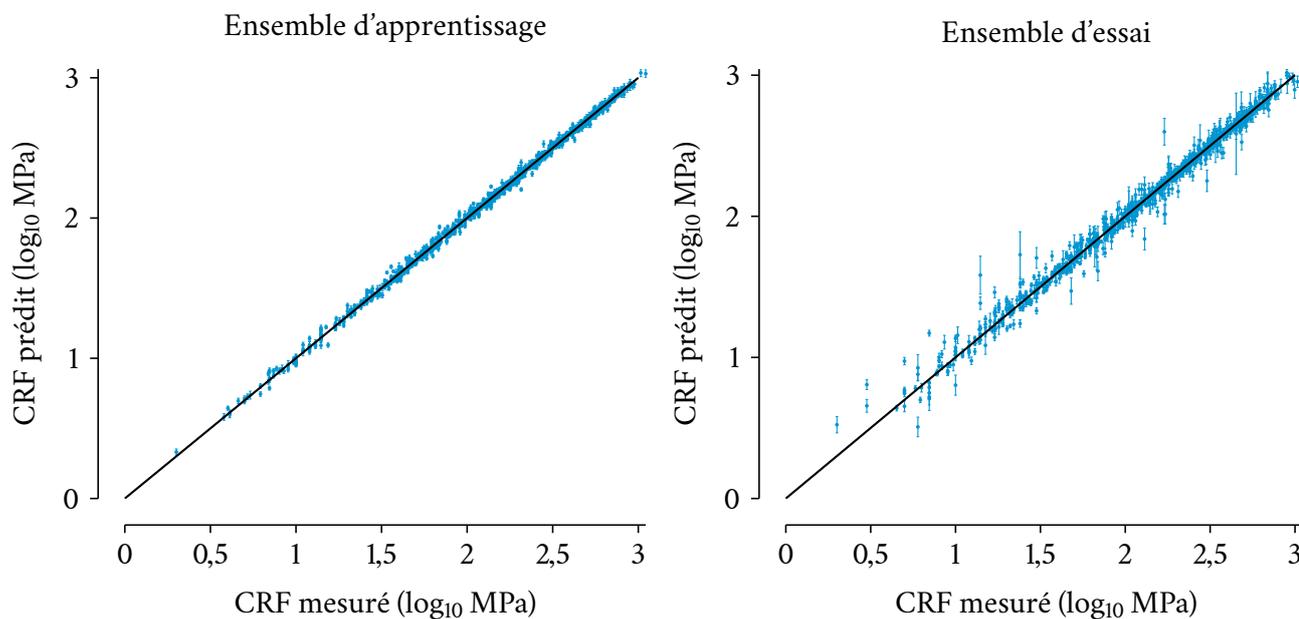


Figure 3.14 — Valeurs prédites par le modèle en fonction des valeurs mesurées de la base de données de la contrainte de rupture par fluage ; à gauche sur l'ensemble d'apprentissage ; à droite sur l'ensemble d'essai.

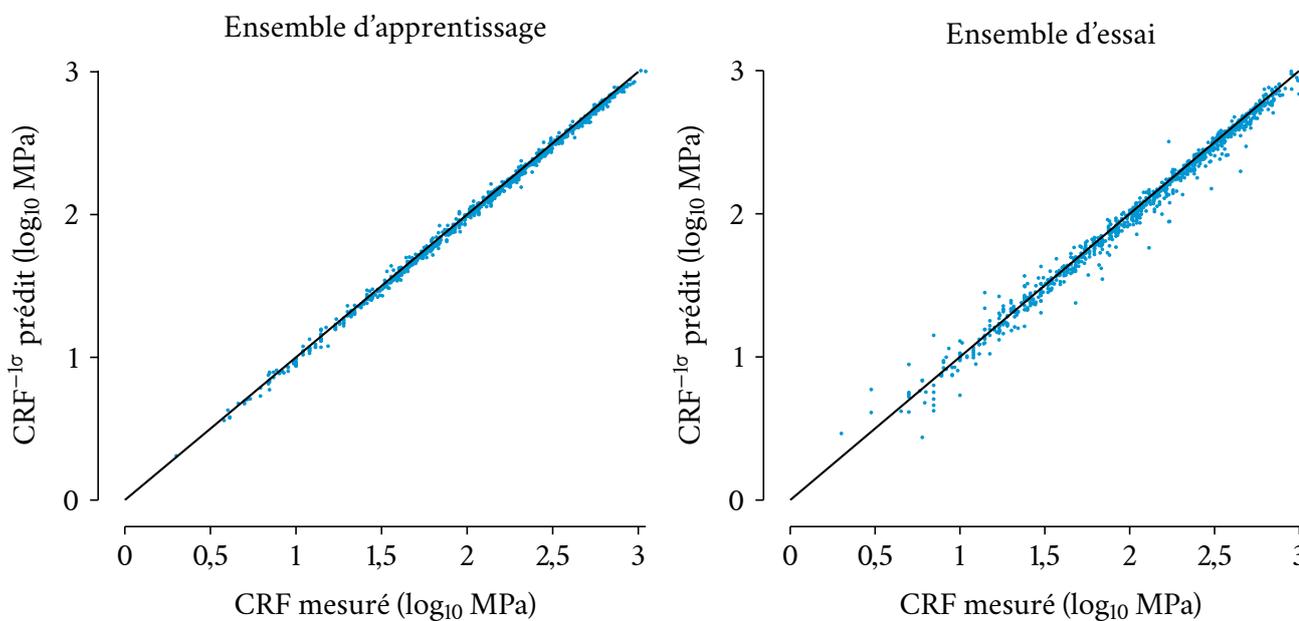


Figure 3.15 — Valeurs prédites par le modèle moins un écart-type en fonction des valeurs mesurées de la base de données de la contrainte de rupture par fluage ; à gauche sur l'ensemble d'apprentissage ; à droite sur l'ensemble d'essai. Sur ce dernier, 704 points sur 982 sont en dessous de la droite, indiquant que la prédiction réduite d'un écart-type est sous-évaluée dans 72 % des cas.

3.3.4 Paramètre de maille de la phase γ

3.3.4.1 Détails de la base de données

La base de données du paramètre de maille de la phase γ est issue de travaux de compilation de Yoshitake & Narayan²⁰⁶. Cette base a pour entrées dix éléments d'alliage ainsi que la température (tableau 3.8). La teneur en éléments correspond à la composition de la phase γ et est, contrairement aux précédentes bases, exprimée en pourcentages atomiques. La sortie est le paramètre de maille, exprimé en angström ($1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$).

TABLEAU 3.8 — Variables de la base de données du paramètre de maille de la phase γ .

	Cr	Co	Mo	W	Nb	Al	Ti	Fe	Ta	Ni	T	a_γ
Unité											°C	Å
Minimum	0	0	0	0	0	0	0	0	0	31,1	15	3,5166
Maximum	34,8	68,9	26,5	15,5	7,9	17	9,5	35,0	8	100	1100	3,6606
Moyenne	8,6	3,1	2,7	1,4	0,1	2,2	0,2	1,8	0,3	79,8	341,2	3,5739
Écart-type	9,9	8,2	5,4	2,5	0,6	2,9	1	5,5	0,8	15,4	338,9	0,0413

La répartition des 370 mesures est donnée sur la figure 3.16. La figure 3.17 montre la distribution des 168 compositions de la phase γ comprises dans la base.

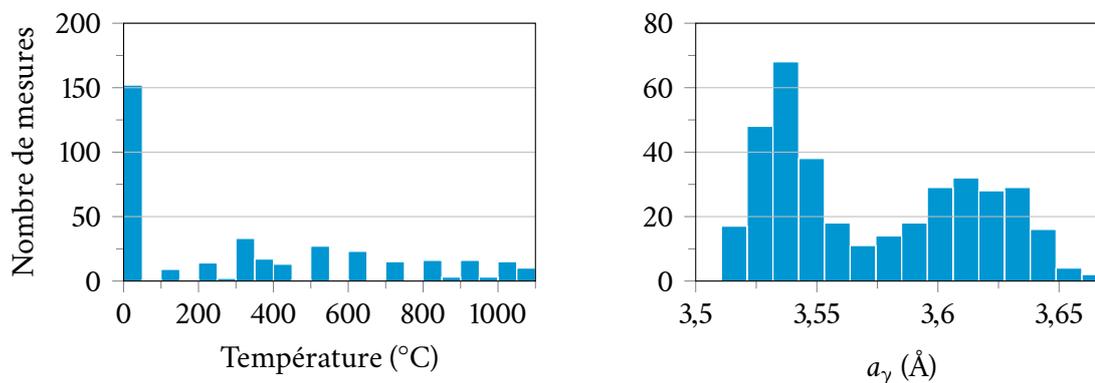


Figure 3.16 — Histogrammes montrant la répartition dans la base de données de la température et de la valeur des mesures du paramètre de maille de la phase γ .

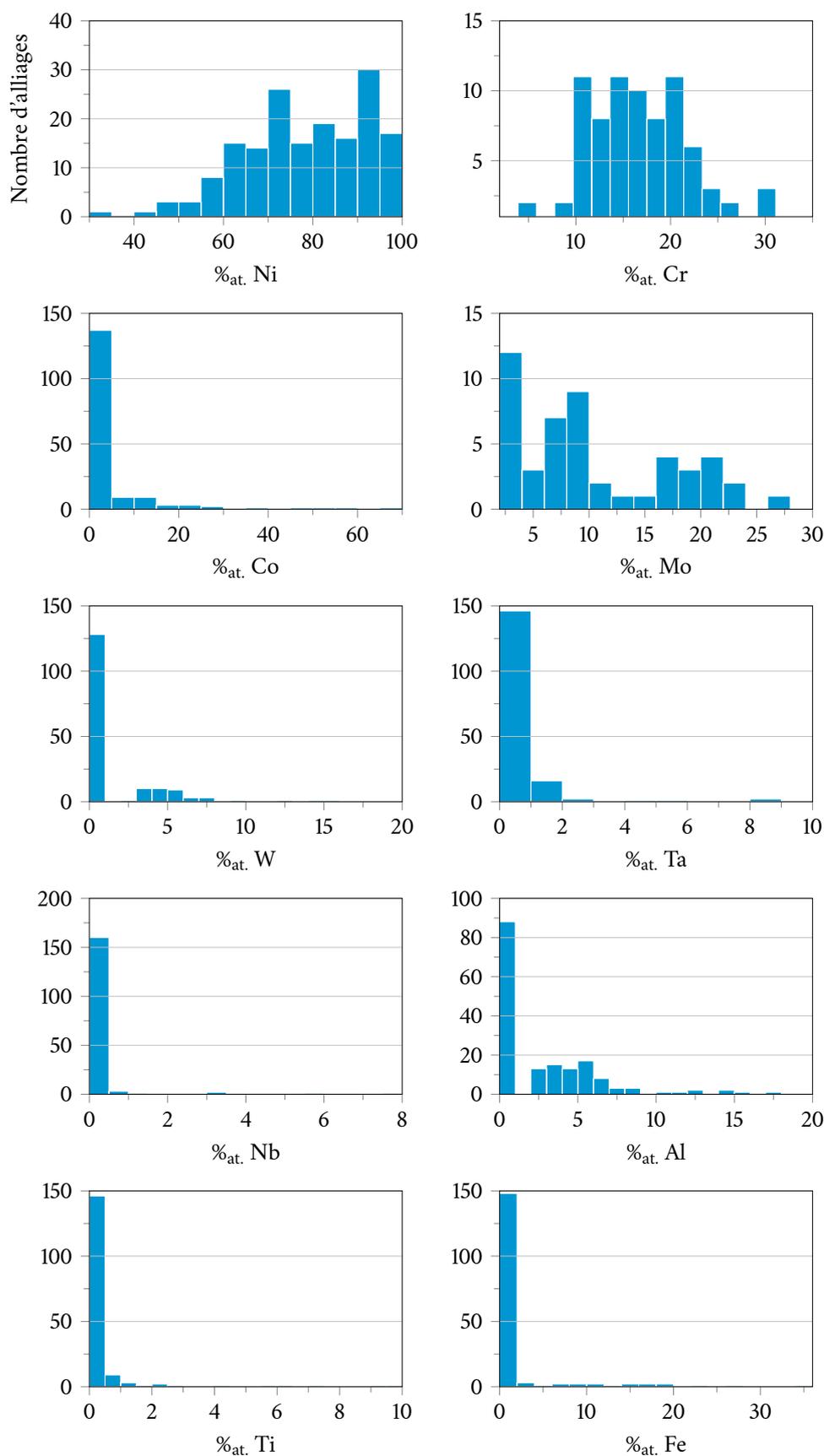


Figure 3.17 — Histogrammes montrant la répartition, dans l'espace des compositions, des alliages de la base de données du paramètre de maille de la phase γ . Les abscisses correspondent à la concentration en éléments dans la phase γ et non à leur teneur nominale dans les alliages.

3.3.4.2 Validation croisée

Les erreurs d'essai et d'apprentissage sont listées dans le [tableau 3.9](#). Celles-ci demeurent raisonnables pour « guider » l'optimisation vers de faibles désaccords paramétriques. La [figure 3.18](#) confirme la capacité de généralisation du modèle.

TABLEAU 3.9 — Erreurs d'essai et d'apprentissage pour le modèle appris à partir de la base de données du paramètre de maille de la phase γ .

#	Set d'essai normalisé		MAE (Å)		MAPE (%)		RMSE (Å)	
	Moyenne	Variance	Essai	Apprentissage	Essai	Apprentissage	Essai	Apprentissage
1	0,386	0,082	0,004	0,001	0,10	0,04	0,008	0,002
	0,409	0,083	0,003	0,002	0,09	0,06	0,007	0,003
2	0,400	0,087	0,004	0,002	0,11	0,07	0,007	0,003
	0,395	0,078	0,004	0,001	0,11	0,03	0,009	0,002
3	0,408	0,088	0,004	0,002	0,12	0,05	0,008	0,003
	0,387	0,077	0,003	0,001	0,09	0,04	0,008	0,002
4	0,394	0,085	0,004	0,001	0,11	0,04	0,008	0,002
	0,401	0,081	0,003	0,002	0,09	0,04	0,008	0,002
5	0,393	0,077	0,003	0,001	0,09	0,04	0,006	0,002
	0,402	0,088	0,004	0,002	0,11	0,05	0,009	0,003
6	0,380	0,080	0,003	0,001	0,08	0,04	0,006	0,002
	0,415	0,085	0,003	0,002	0,10	0,05	0,008	0,002
7	0,394	0,087	0,003	0,002	0,10	0,04	0,007	0,002
	0,401	0,078	0,003	0,001	0,09	0,04	0,007	0,002
8	0,415	0,088	0,004	0,002	0,10	0,05	0,007	0,003
	0,381	0,077	0,003	0,001	0,08	0,04	0,007	0,002
9	0,399	0,086	0,003	0,001	0,09	0,04	0,006	0,002
	0,396	0,080	0,004	0,002	0,12	0,05	0,009	0,003
10	0,378	0,078	0,003	0,001	0,09	0,04	0,007	0,002
	0,417	0,087	0,004	0,002	0,10	0,04	0,008	0,002
Moyenne	0,398	0,082	0,004	0,002	0,10	0,04	0,008	0,002

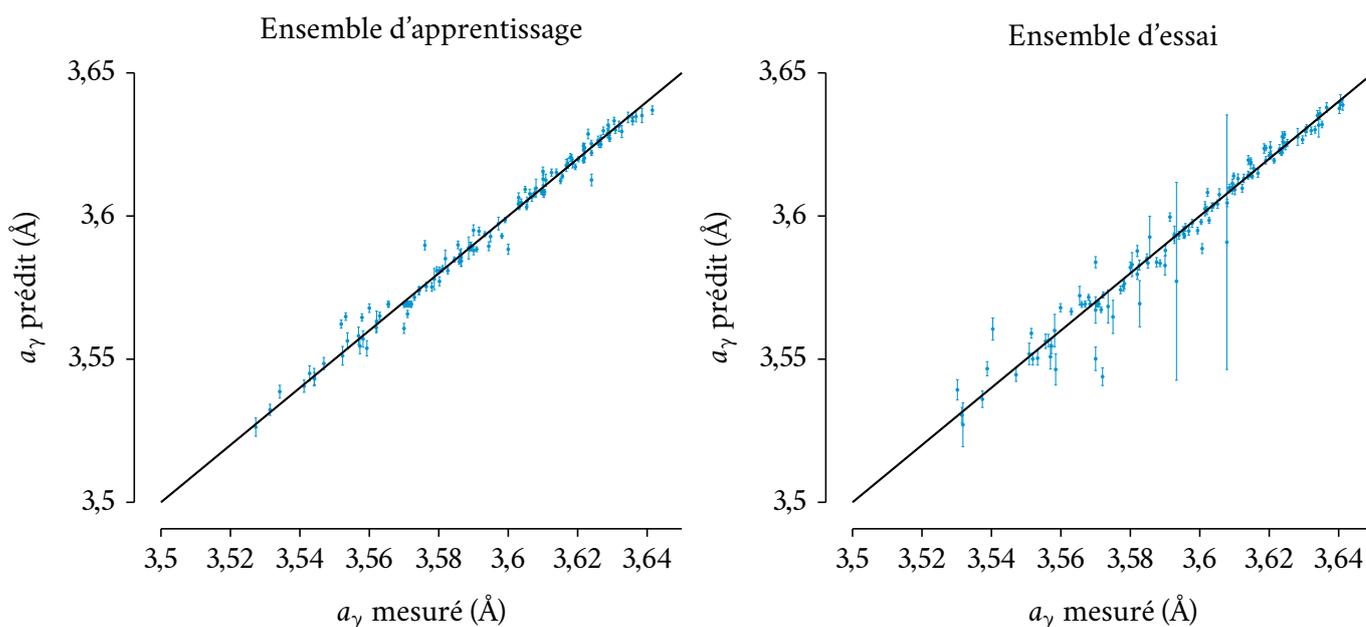


Figure 3.18 — Valeurs prédites par le modèle en fonction des valeurs mesurées de la base de données du paramètre de maille de la phase γ ; à gauche sur l'ensemble d'apprentissage ; à droite sur l'ensemble d'essai.

3.3.5 Paramètre de maille de la phase γ'

3.3.5.1 Détails de la base de données

La base de données du paramètre de maille de la phase γ'^{206} possède les mêmes entrées que la base de données du paramètre de maille de la phase γ : dix éléments d'alliage ainsi que la température (tableau 3.10). Ici aussi, la teneur en éléments correspond à la composition de la phase γ' .

TABLEAU 3.10 — Variables de la base de données du paramètre de maille de la phase γ' .

	Cr	Co	Mo	W	Nb	Al	Ti	Fe	Ta	Ni	T	$a_{\gamma'}$
Unité						% _{at.}					°C	Å
Minimum	0	0	0	0	0	0	0	0	0	32	20	3,5273
Maximum	34,8	25	4,8	4,9	8	26	20	64	8,9	90,2	1100	3,6415
Moyenne	3,5	1,2	0,7	1	0,2	16,1	1,4	1,3	1,8	72,8	373,1	3,5941
Écart-type	5,8	2,7	1,2	1,4	0,7	5,6	2,9	6,9	2,1	5,2	386,2	0,0278

La figure 3.19 montre la variété des 143 compositions de la phase γ' comprises dans la base. La répartition des 252 mesures est donnée sur la figure 3.20.

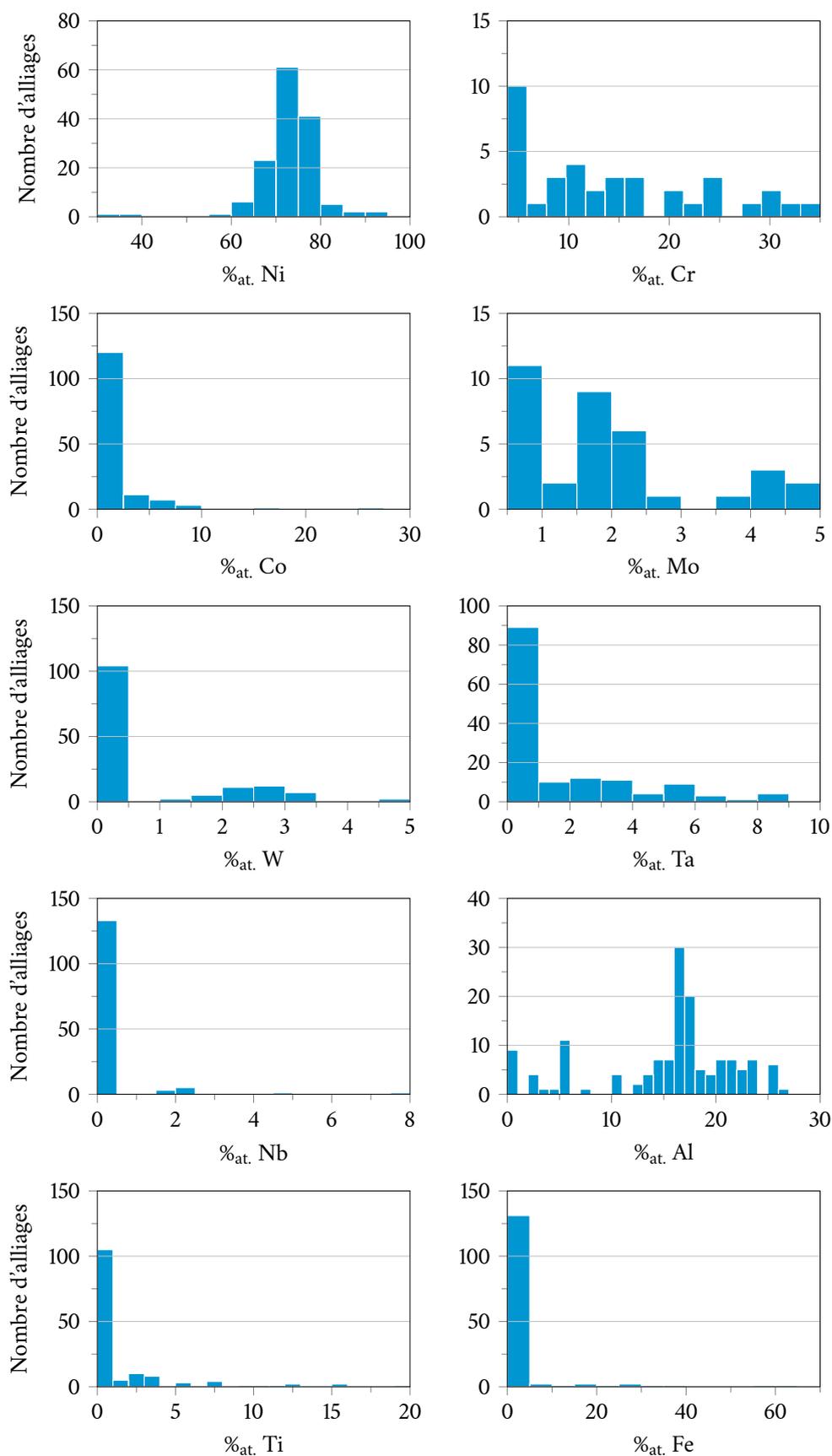


Figure 3.19 — Histogrammes montrant la répartition, dans l'espace des compositions, des alliages de la base de données du paramètre de maille de la phase γ' . Les abscisses correspondent à la concentration en éléments dans la phase γ' et non à leur teneur nominale dans les alliages.

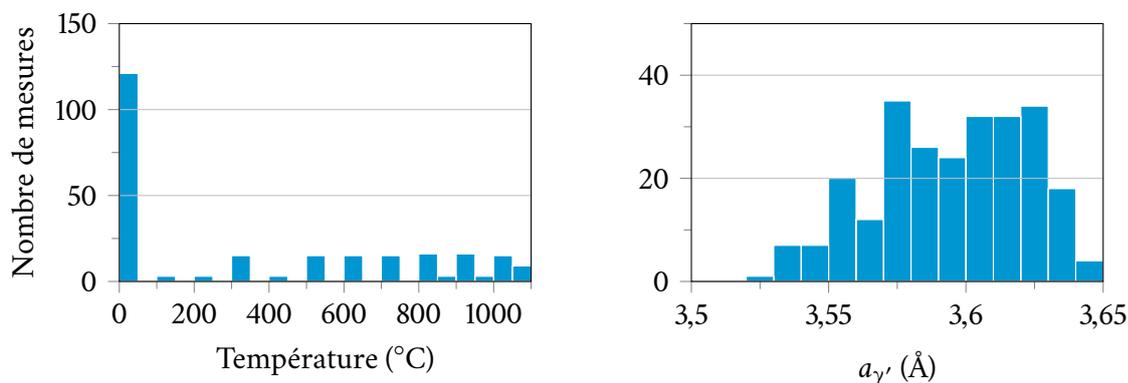


Figure 3.20 — Histogrammes montrant la répartition dans la base de données de la température et de la valeur des mesures du paramètre de maille de la phase γ' .

TABLEAU 3.11 — Erreurs d'essai et d'apprentissage pour le modèle appris à partir de la base de données du paramètre de maille de la phase γ' .

#	Set d'essai normalisé		MAE (Å)		MAPE (%)		RMSE (Å)	
	Moyenne	Variance	Essai	Apprentissage	Essai	Apprentissage	Essai	Apprentissage
1	0,567	0,060	0,003	0,002	0,08	0,07	0,005	0,003
	0,602	0,059	0,004	0,002	0,11	0,06	0,007	0,003
2	0,574	0,056	0,003	0,003	0,08	0,08	0,004	0,004
	0,596	0,063	0,003	0,002	0,09	0,05	0,006	0,003
3	0,589	0,061	0,003	0,003	0,08	0,07	0,004	0,004
	0,581	0,058	0,003	0,002	0,09	0,06	0,005	0,003
4	0,580	0,060	0,004	0,002	0,11	0,07	0,006	0,004
	0,590	0,059	0,003	0,002	0,09	0,05	0,006	0,002
5	0,555	0,061	0,005	0,002	0,13	0,05	0,009	0,003
	0,614	0,056	0,004	0,002	0,10	0,07	0,005	0,003
6	0,562	0,064	0,003	0,002	0,09	0,06	0,005	0,003
	0,608	0,054	0,003	0,003	0,08	0,07	0,004	0,004
7	0,591	0,060	0,004	0,002	0,11	0,06	0,006	0,003
	0,579	0,059	0,003	0,002	0,09	0,06	0,005	0,003
8	0,595	0,062	0,003	0,003	0,09	0,08	0,004	0,004
	0,575	0,056	0,003	0,001	0,09	0,03	0,006	0,002
9	0,625	0,051	0,004	0,002	0,12	0,04	0,008	0,002
	0,545	0,065	0,003	0,002	0,10	0,06	0,005	0,003
10	0,596	0,064	0,003	0,002	0,09	0,07	0,005	0,004
	0,574	0,055	0,005	0,002	0,13	0,05	0,008	0,003
Moyenne	0,585	0,059	0,004	0,002	0,10	0,06	0,006	0,003

3.3.5.2 Validation croisée

Les erreurs sont similaires à celles du précédent modèle sur le paramètre de maille de la phase γ (tableau 3.11). La figure 3.21 confirme la généralisation correcte du modèle à des valeurs absentes des données d'apprentissage.

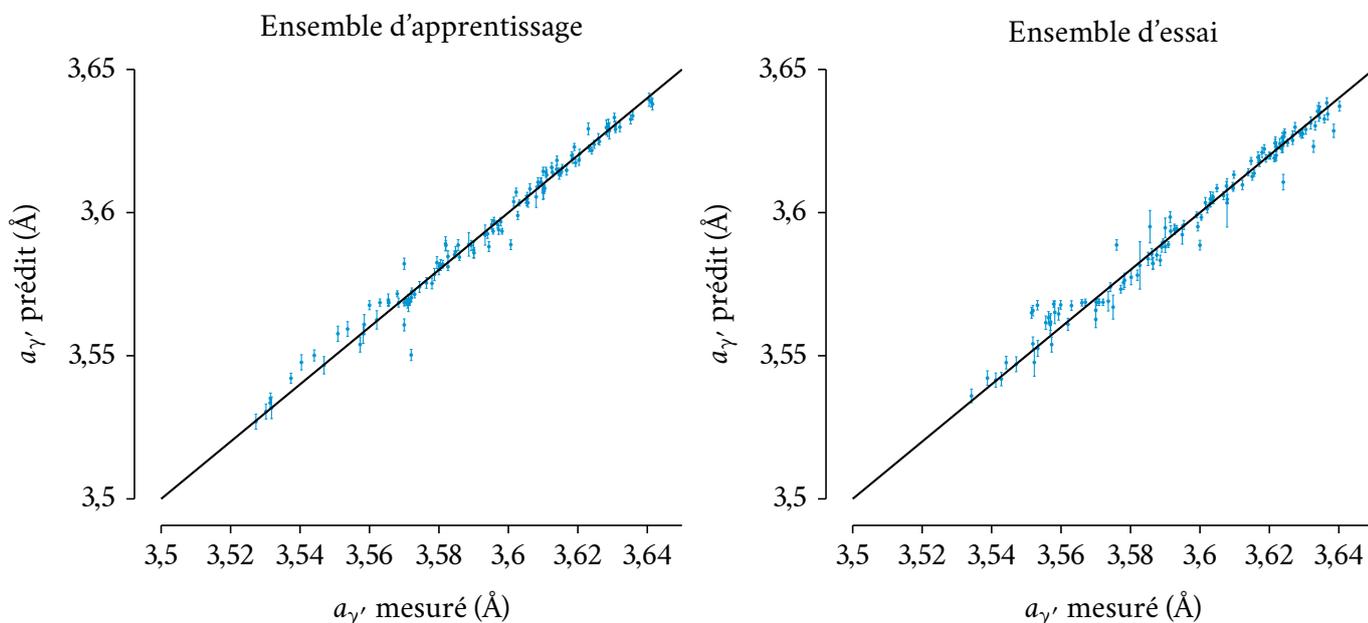


Figure 3.21 — Valeurs prédites par le modèle en fonction des valeurs mesurées de la base de données du paramètre de maille de la phase γ' ; à gauche sur l'ensemble d'apprentissage ; à droite sur l'ensemble d'essai.

3.4 Résumé des critères de conception

Concevoir des superalliages dont la microstructure d'équilibre est stable constitue une garantie de performance en vue des longs maintiens en température caractéristiques de leurs applications. Dans cette logique, il semble légitime lors de la conception de restreindre la constitution des alliages aux phases bénéfiques, qui devront être stables à la température de service. Cette contrainte impose le rejet de certaines phases par définition instables (comme la phase γ'') ou potentiellement délétères (comme la phase η et les phases TCP). Restent trois constituants principaux : les phases γ et γ' ainsi que les carbures $M_{23}C_6$. Le respect du critère issu de la méthode `NEW PHACOMP` peut compléter la sécurité offerte par la thermodynamique prédictive.

La stabilité en température de la phase γ' est primordiale afin d'éviter l'amointrissement prématuré des propriétés thermomécaniques. Dans cette optique, le désaccord paramétrique doit être minimisé^{185,187} de manière à restreindre le grossissement des précipités. Ce désaccord est prédictible par le biais de deux modèles de régression par processus gaussiens fournissant une estimation du paramètre de maille des phases γ et γ' à partir de leur composition, déterminée par la méthode `CALPHAD`.

La facilité de fabrication est un autre aspect capital dans la conception des superalliages corroyés ; celle-ci inclut la capacité de mise en forme par forgeage et d'assemblage par soudage. La constitution des alliages en est un paramètre essentiel : pour éviter des problèmes de fissuration, la quantité de phase durcissante γ' doit être limitée et l'intervalle de solidification réduit, notamment en limitant l'ajout d'éléments susceptibles de ségréger à l'interface solide-liquide tel le niobium.

Essentielle, la protection contre la corrosion et l'oxydation à chaud impose l'ajout en quantité suffisante de chrome. La méthode CALPHAD permet de s'assurer que les additions de chrome sont pertinentes, c'est-à-dire qu'elles contribuent à la genèse d'une couche de passivation et non pas à la formation de phases indésirables. Le contrôle de la teneur en chrome libre permet également d'ajuster sa teneur nominale minimale en fonction de sa répartition dans les précipités désirables (carbures $M_{23}C_6$ et phase γ').

De surcroît, les propriétés d'usage des superalliages doivent être améliorées de manière à garantir leur tenue mécanique. Les superalliages conçus doivent ainsi posséder de bonnes propriétés mécaniques en traction ainsi qu'une bonne résistance au fluage afin d'être en mesure de faire face aux sollicitations en service.

Enfin, deux critères de conception essentiels restent à évoquer : la masse volumique et le coût. La masse volumique des superalliages destinés à l'aéronautique est une quantité dont la réduction est intéressante car, les superalliages représentant une proportion non négligeable du poids d'une turbine à gaz, elle permet des économies de carburant. En outre, dans les pièces en rotation comme les disques ou aubes de turbines, les contraintes d'origine centrifuge sont proportionnelles à la masse volumique; réduire cette dernière peut alors être un objectif judicieux. Il est possible de calculer la masse volumique de superalliages analytiquement¹⁹; dans ce travail il est fait usage du modèle de Hull décrit dans la référence 207.

La réduction du coût, ou l'amélioration du ratio propriété/coût, est un objectif logique. Le coût d'un superalliage est ici estimé sur la base du prix de ses éléments d'alliage moyenné sur cinq ans de manière à prendre en compte les fluctuations du marché. À des fins de comparaison, le coût d'un alliage est rapporté à celui du nickel.

Les critères d'optimisation étant détaillés, la partie suivante s'intéresse aux modifications apportées à l'algorithme génétique NSGA-II afin de procéder à l'optimisation à maints objectifs de la composition de superalliages.

3.5 Adaptation de l'algorithme génétique

3.5.1 Multiples instances

Comme l'a été montrée dans la section précédente, la conception de superalliages implique la considération d'un grand nombre d'objectifs, et constitue ainsi un problème d'optimisation dit à maints objectifs. L'utilisation de NSGA-II pour la résolution de ce genre de problèmes est la source de plusieurs difficultés. L'une d'entre elles concerne le concept de domination au sens de Pareto qui, pour de nombreux objectifs, ne permet pas de discriminer efficacement les solutions et qui tend ainsi à entraver la recherche d'individus à la fois optimaux et divers. Ces difficultés seront illustrées par l'exemple à l'issue des applications; cette section vise à détailler la stratégie ayant permis d'obtenir des résultats satisfaisants.

Plusieurs instances (typiquement quatre) de l'algorithme NSGA-II détaillé dans le chapitre précédent sont utilisées. Le générateur de nombres pseudo-aléatoires de chacune de ces instances, servant à la sélection et à la transformation des individus, est initialisé avec une « graine » différente; chaque instance conduit donc la recherche dans une direction différente. En outre, chacune de ces instances entretient une archive en ligne (c'est-à-dire une population secondaire qui permet la sauvegarde des individus non-dominés trouvés au cours de l'optimisation). Cette archive est « mise à jour » à la fin de chaque génération suite aux opérations de transformation génétique et d'évaluation des caractéristiques des individus.

Ces archives sont périodiquement fusionnées (typiquement toutes les 25 générations) dans une archive globale (figure 3.22). Un tri de non-dominance permet de n’y conserver que les individus non dominés par rapport à tous les individus des quatre archives locales. Une fois le tri effectué, des membres de l’archive globale sont injectés dans la population de chaque instance de NSGA-II. Si la taille de l’archive globale est inférieure ou égale à la taille de la population, tous les individus de l’archive sont injectés; si la taille de l’archive est supérieure, alors les individus injectés sont sélectionnés aléatoirement. Les populations ainsi régénérées continuent leur évolution pendant un nombre prédéfini de générations au bout duquel la procédure d’injection est réitérée.

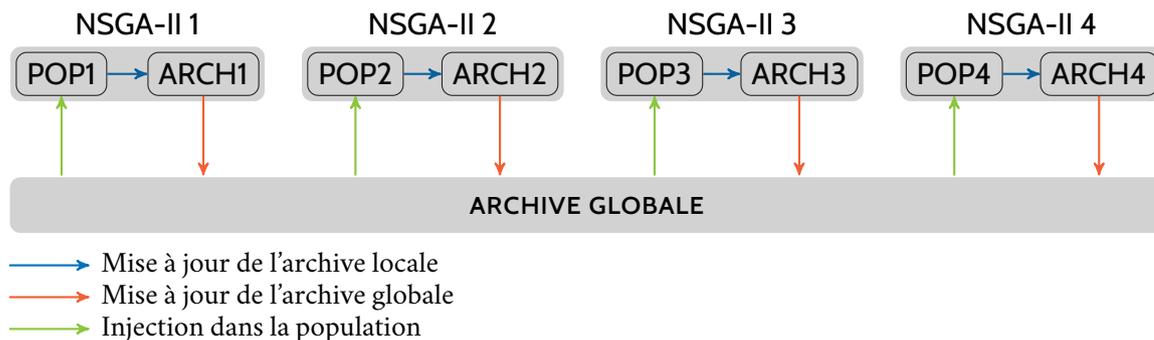


Figure 3.22 — Fonctionnement schématique de l’algorithme d’optimisation. Quatre instances de l’algorithme NSGA-II fonctionnent chacune avec leur population (« POP ») et leur archive locale (« ARCH »), mise à jour à chaque génération. Toutes les 25 générations, ces archives sont combinées dans une archive globale qui ne conserve que les individus Pareto-optimaux. Des membres de l’archive globale sont ensuite injectés dans chacune des populations qui reprennent alors leur évolution.

L’emploi de plusieurs instances permet de diversifier les chemins exploratoires. En effet, l’exploration de chaque algorithme étant conduite indépendamment, chacun peut obtenir des résultats différents en parcourant des parties de l’espace de recherche inexploitées par les autres instances.

En ce sens, la méthodologie d’optimisation proposée ressemble aux approches coévolutionnaires.¹⁸⁰ Selon cette approche, « deux têtes valent mieux qu’une » : l’utilisation de plusieurs algorithmes génétiques différents peut contribuer à augmenter l’efficacité de la recherche en combinant leurs forces (rapidité, capacité d’exploration ou de diversification, etc.). La principale différence entre les deux méthodes réside dans l’utilisation d’un unique algorithme dans cette étude, et non de plusieurs algorithmes différents.

L’entretien de quatre populations est également similaire aux techniques d’évolution « par îles¹⁸⁰ ». Ces techniques proposent la répartition de l’effort de recherche sur plusieurs populations localisées chacune sur une île. Chaque île possède ses propres « règles » évolutionnaires conduisant à des variations génétiques différentes. Des individus peuvent « migrer » régulièrement d’une île vers une autre, ce qui se traduit par un changement de direction de recherche. En effet, un individu adapté à une île ne l’est pas forcément sur toutes; la migration le contraint à s’adapter ou à disparaître (ce qui signifierait que l’île sur laquelle l’individu a migré a progressé plus loin dans la recherche d’individus optimaux que son île d’origine). De nouveau, l’approche adoptée ici est un peu différente dans la mesure où l’algorithme et les règles de sélection sont les mêmes sur toutes les îles.

3.5.2 Contraintes comme objectifs

La conception d’alliages à l’aide des critères détaillés précédemment implique d’une part la recherche d’individus respectant les contraintes thermodynamiques et d’autre part l’optimisation de

leur composition pour bonifier leurs propriétés mécaniques; les contraintes sont ainsi distinctes des objectifs.

Dans le paradigme d'optimisation mono-objectif, les contraintes sont souvent combinées avec la valeur de la fonction objectif par l'intermédiaire d'une fonction de scalarisation dont le paramétrage (par exemple le choix des poids de chaque objectif et contrainte) peut être complexe. Dans le cadre d'une optimisation multiobjectifs, ces contraintes peuvent être considérées comme des objectifs supplémentaires.¹⁸⁰ Il est ainsi possible de reformuler un problème à n objectifs et m contraintes en un problème à $n + m$ objectifs. Dans cette étude, les contraintes décrites précédemment sont transformées en fonction de pénalisation dont l'unique paramètre est la valeur désirée de la contrainte. Dans le cas d'une minimisation, la fonction de pénalité $p(x, \tau)$ est définie par :

$$p(x, \tau) = \begin{cases} x - \tau & \text{if } x > \tau, \\ 0 & \text{autrement,} \end{cases} \quad (3.10)$$

x étant la valeur de la contrainte et τ la valeur visée. La pénalité croît avec l'amplitude de violation de la contrainte. Par exemple, si l'on désire limiter la fraction volumique d'une phase à 0,2, un individu à 0,3 se voit assigner une pénalité de $0,3 - 0,2 = 0,1$, tandis que tout individu présentant une fraction en deçà n'est pas pénalisé. Les individus respectant l'ensemble des contraintes sont dits « faisables » (*feasible*); ils vérifient la relation suivante :

$$\sum_{i=1}^m p(x_i, \tau_i) = 0 \quad (3.11)$$

3.5.3 Paramétrage de l'algorithme

Tous les algorithmes génétiques employés en parallèle font usage des mêmes opérateurs, eux-mêmes paramétrés identiquement. La fonction de reproduction est l'opérateur SBX^{161,162} dont le paramètre η_c , déterminant la distance entre parents et enfants, est fixé à 10; cette valeur se traduit par des enfants centrés autour de leurs parents, c'est-à-dire proches en matière de composition (les gènes des parents se retrouvent, peu modifiés et peu mêlés, dans les enfants). Le taux de reproduction (la probabilité qu'un individu serve de parent) est de 70 %. Le taux de mutation, c'est-à-dire la probabilité qu'un enfant subisse une mutation, s'élève à 10 %. La taille de la population est fixée à 500 individus. La fusion des archives locales et la régénération de chaque population sont opérées toutes les 25 générations.

Ces valeurs de paramètres, déterminées par essai-erreur, ont permis l'obtention de résultats corrects, comme sera vu dans les sections suivantes.

3.5.4 Économies d'évaluations

Un certain nombre de mécanismes sont mis en place afin de réduire le nombre d'appels à thermodynamique prédictive et aux processus gaussiens.

Un individu évalué n'est jamais réévalué : la valeur de ses propriétés et contraintes est gardée en mémoire pendant le temps qu'il demeure dans la population ou dans l'archive.

Un calcul d'équilibre thermodynamique prend 20 à 40 ms dans les systèmes thermodynamiques typiques des superalliages (~10-12 éléments d'addition). Afin de réduire leur nombre, les contraintes thermodynamiques sont calculées en série à la condition que la précédente contrainte soit vérifiée; ce mode d'évaluation peut être qualifié de « paresseux ». L'évaluation d'un individu ne respectant

pas une contrainte n'est pas menée à terme ; à la place, son vecteur objectif est complété par des valeurs factices pour remplacer les quantités ne pouvant être déterminées sans calcul. Ces pénalités sont choisies de sorte que l'individu est disqualifié lors des sélections.

L'entretien d'une archive locale permet également de réduire le nombre d'équilibres thermodynamiques calculés. En faisant l'hypothèse qu'un alliage est éligible à l'entrée de l'archive parce qu'il vérifie les contraintes thermodynamiques, il est possible de déterminer si celui-ci est optimal par rapport aux membres de l'archive en estimant seulement les caractéristiques rapidement évaluées (tels le coût ou les propriétés prédites par des processus gaussiens). Si l'alliage est dominé, ses contraintes thermodynamiques ne sont pas calculées ; leur est alors affectée une valeur pénalisante qui rend l'alliage infaisable. Inversement, si l'alliage domine un individu de l'archive, la vérification des contraintes thermodynamiques a lieu et conditionne son intégration effective dans l'archive.

La pertinence des adaptations de l'algorithme sera discutée de manière pragmatique dans les sections applicatives, à la lumière des résultats.

3.5.5 Métriques

Plusieurs quantités peuvent être calculées au cours de l'optimisation afin de s'assurer du bon fonctionnement de l'algorithme et de juger de l'état de la convergence des solutions vers un optimum (sans pour autant déterminer son type, local ou global). Dans ce travail, les métriques suivantes sont calculées :

- le temps passé à chaque génération ;
- le nombre d'évaluations et de calculs d'équilibre thermodynamique par génération ;
- le ratio d'amélioration relatif,²⁰⁸ défini comme le nombre d'individus de l'archive de la génération $n - 1$ dominés par des individus de l'archive de la génération n rapporté à la taille de l'archive à la génération $n - 1$:

$$\frac{\text{taille}(\text{archive}_n > \text{archive}_{n-1})}{\text{taille}(\text{archive}_{n-1})} \quad (3.12)$$

où l'opérateur $>$ représente la domination de Pareto ;

- l'amélioration absolue, similaire au ratio d'amélioration relatif :

$$\text{taille}(\text{archive}_n > \text{archive}_{n-1}) \quad (3.13)$$

Cette quantité représente le nombre d'individus de l'archive de la génération $n - 1$ dominés par des individus de la génération n ;

- le nombre d'individus dont les contraintes thermodynamiques n'ont pas été calculées grâce à la vérification *a priori* de leur domination ; ce nombre est désigné « économies » ;
- le nombre d'individus faisables évalués par génération.

L'usage et la valeur de ces métriques seront discutés dans les sections applicatives qui suivent.

3.6 Optimisation sans aide à la décision : cas illustratif

Dans un premier temps, l'algorithme d'optimisation est illustré sur un cas simple afin de confirmer ses performances. La présente étude de cas porte sur la conception de superalliages destinés aux

centrales thermiques de dernière génération, les centrales ultra-supercritiques avancées (*Advanced Ultra-SuperCritical power plants, A-USC*). Dans ces centrales, l'augmentation des températures de fonctionnement des turbines à vapeur impose en effet le remplacement des aciers spéciaux par des superalliages à base de nickel, plus résistants mais plus chers. Minimiser leur coût permet de rendre plus viable leur usage en tant que matériaux pour disque et aube de turbine ou tuyauterie transportant la vapeur. La température de service envisagée pour de telles applications est d'environ 750 °C. Les alliages doivent être stables, résistants au fluage et à l'oxydation à haute température, soudables, forgeables et peu onéreux.

3.6.1 Espace de recherche

Les éléments devant être optimisés sont listés dans le [tableau 3.12](#). Le nickel, le cobalt et le fer constituent les éléments de base, ce dernier étant ajouté pour réduire le coût. Le molybdène, le tungstène et le niobium offrent un renforcement par solution solide. L'aluminium et le titane permettent la formation de précipités γ' . Le carbone et le bore fortifient les joints de grains, notamment *via* la formation de carbures. Le chrome est essentiel à la formation de ces carbures ainsi qu'à la résistance à la corrosion.

TABLEAU 3.12 — Nature des éléments d'alliage et bornes de l'espace de recherche (%_{mass.}).

Éléments	Ni	Co	Fe	Cr	Mo	W	Nb	Al	Ti	C	B
Bornes	reste	0 21	0 30	15 25	0 2	0 6	0 5	0 5	0 5	0 0,15	0 0,005
Pas	—					0,1				0,01	—

Les bornes de ces éléments délimitent un espace de recherche d'environ 10^{16} combinaisons. Faire un calcul thermodynamique pour chacune d'elles prendrait environ dix millions d'années, ce qui justifie le recours à une métaheuristique.

Au sein de l'algorithme génétique, les gènes prennent la valeur des teneurs en éléments divisée par le pas. Dans l'espace génotypique, le chrome varie alors entre 150 et 250 de manière continue; l'utilisation de l'opérateur SBX, qui manipule des variables réelles, est ainsi possible. À l'étape d'évaluation, la valeur des gènes est arrondie à l'entier le plus proche et multipliée par le pas pour retrouver la teneur de chaque élément.

3.6.2 Objectifs et contraintes

Les contraintes thermodynamiques sont les suivantes :

- les alliages ne doivent être constitués que de phases γ , γ' et $M_{23}C_6$ à 750 °C; cette contrainte est étendue à 700 °C afin de garantir une plus large fenêtre de stabilité thermodynamique¹⁵;
- un pourcentage maximal de 25 %_{mol.} de phase γ' est toléré afin de n'affecter ni la soudabilité ni la forgeabilité;
- un minimum de 24 %_{at.} de chrome dans la matrice (γ) est requis de manière à assurer la résistance à la corrosion.

Les objectifs sont partiellement réalistes en vue d'applications dans des centrales thermiques; il s'agit de :

- minimiser le coût de l'alliage tel que calculé à partir de la teneur nominale en éléments;
- maximiser la contrainte de rupture par fluage réduite d'un écart-type, $CRF^{-1\sigma}$, à 750 °C en 1000 h.

Un temps de rupture de 1000 h limite la possibilité que le modèle extrapole exagérément étant donné le nombre de mesures limité pour des temps supérieurs (cf. [figure 3.11](#)). La contrainte réduite prend en compte l'incertitude de la prédiction du processus gaussien; sa maximisation garantit une sorte de conception « robuste » car l'optimisation est conduite sur une valeur plutôt « pessimiste » (cf. [figure 3.15](#)), ce qui minimise le risque que les alliages conçus présentent en pratique des propriétés plus faibles que prévues. De surcroît, la prise en compte de l'incertitude contraint l'algorithme d'optimisation à ne pas explorer des régions de compositions pour lesquelles d'importantes erreurs sont prédites.

La [figure 3.23](#) illustre l'enchaînement des calculs pour un individu (à gauche) et leur résultat sur son vecteur objectif (à droite). Chaque individu démarre avec un vecteur objectif vide destiné à contenir :

- la valeur des contraintes, représentant des pénalités (cf. [sous-section 3.5.2](#)) sur :
 - la fraction molaire de phases indésirables à 700 °C : PI_{700} ;
 - la fraction molaire de phases indésirables à 750 °C : PI_{750} ;
 - la fraction molaire de phase γ' à 750 °C : $V(\gamma')$;
 - la concentration atomique de chrome dans la phase γ à 750 °C : $(Cr)_{\gamma}$;
- la valeur des objectifs :
 - le coût de l'alliage : EUR ;
 - la contrainte de rupture par fluage réduite : $CRF^{-1\sigma}$.

L'évaluation démarre avec l'estimation du coût et de la résistance en fluage; le vecteur objectif est complété de leurs valeurs x et y . Si l'alliage présente des propriétés sous-optimales comparées aux alliages de l'archive, l'évaluation est arrêtée et l'alliage reçoit une pénalité P sur chacune de ses contraintes. Sinon, l'évaluation se poursuit avec le calcul de l'équilibre à 750 °C. La quantité de phases indésirables F_{750}^{PI} est déterminée et est affectée à la variable PI_{750} ; si celle-ci est non nulle, le reste des contraintes prend la valeur de la pénalité P . Sinon, les pénalités p_2 sur le volume molaire de γ' et p_3 sur la teneur de chrome dans la matrice entrent dans le vecteur objectif. L'évaluation procède de façon identique pour l'équilibre à 700 °C avec la dernière contrainte PI_{700} . La valeur de P est choisie de telle sorte qu'elle soit supérieure à tous les p_i et F_i^{PI} .

Ce système de pénalisation signifie que la population est classée selon les règles suivantes :

- un individu faisable est toujours préféré à un individu infaisable;
- lorsque deux individus faisables sont comparés, l'individu Pareto-optimal est préféré;
- lorsque deux individus infaisables sont comparés, l'individu Pareto-optimal est aussi préféré; dans ce cas, celui-ci représente l'individu « le moins infaisable » des deux, c'est-à-dire celui violant le moins de contraintes ou, à nombre de contraintes non-respectées égal, celui présentant la plus faible pénalité sur la première contrainte violée.

De cette manière, de « bons » individus infaisables sont conservés dans la population, ce qui bénéficie à la recherche car (i) ces individus permettent de s'échapper de certains optimums locaux et (ii) le front de Pareto est approché à la fois des côtés faisable et infaisable de l'espace. L'addition des contraintes au vecteur objectif permet en effet d'orienter la recherche vers des domaines faisables de l'espace des compositions (ce qui constitue un problème de satisfaction des contraintes) qui, une fois trouvés, sont exploités pour la recherche d'individus performants en matière de propriétés. Il est à noter que la domination de Pareto employée pour deux individus faisables est particulière; les contraintes, étant vérifiées, ne servent en effet plus de critères de comparaison. L'optimisation à six objectifs se trouve ainsi reformulée en problème bi-objectifs.

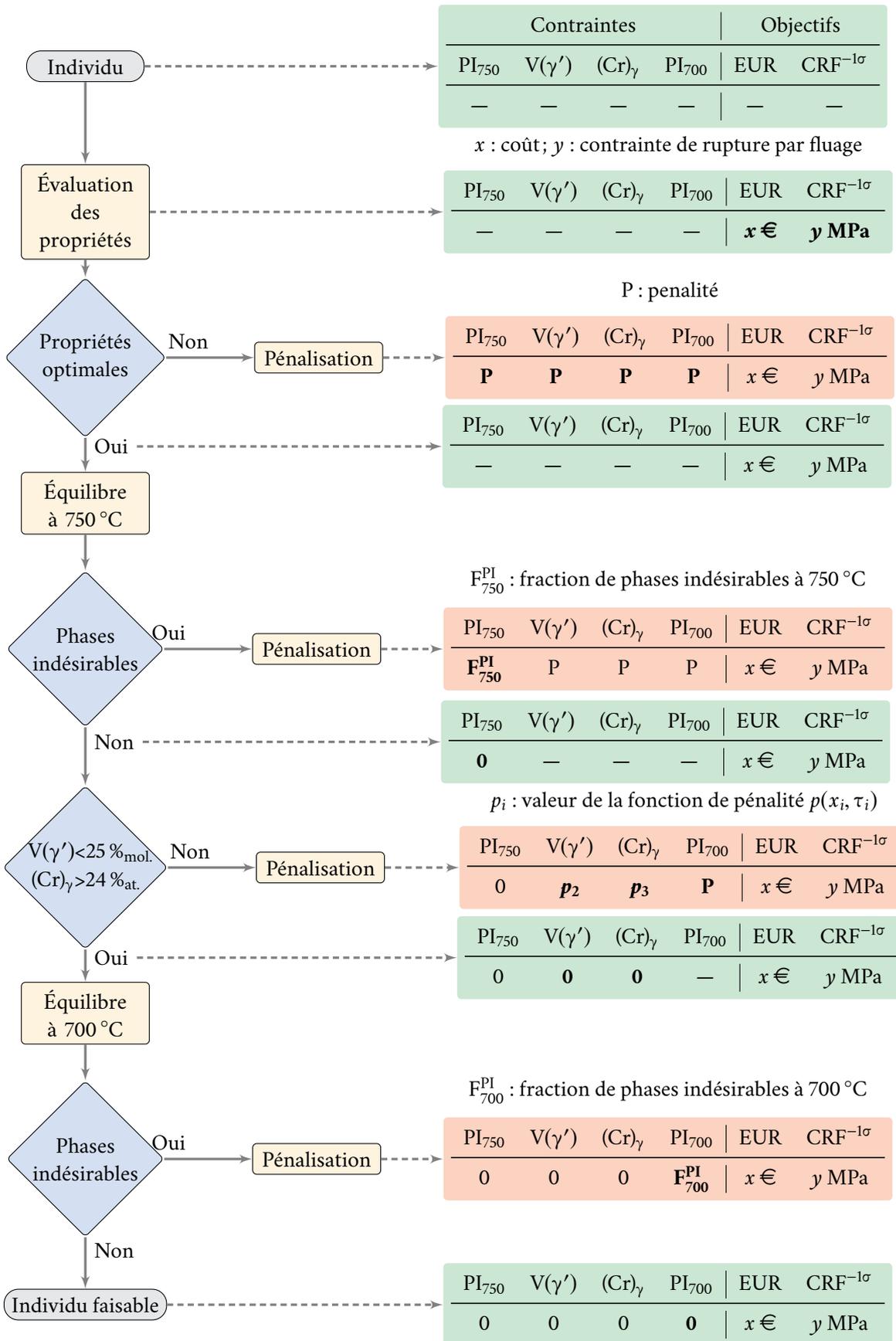


Figure 3.23 — Organigramme simplifié d'évaluation des objectifs et des contraintes d'un individu. Les opérations successives sont listées à gauche, leur action sur le vecteur objectif de l'individu à droite. La grandeur P représente une pénalité ($P > p_i, F_i^{PI}$). F_{750}^{PI} et F_{700}^{PI} sont les fractions molaires totales de phases indésirables (PI) à 750 °C et 700 °C respectivement. p_i est la valeur de la fonction de pénalité sur les contraintes de constitution.

3.6.3 Résultats

Environ 60 h ont été nécessaires pour le calcul de mille générations par chacune des quatre instances coopératives sur un micro-ordinateur équipé de deux processeurs à quatre cœurs cadencés à 2,4 GHz. L'optimisation a demandé 1,46 millions d'évaluations et 1,19 millions de calculs thermodynamiques. Le nombre d'économies s'élève à 385 000, ce qui représente un gain d'environ 2 h de calcul — économie somme toute relativement modeste. La mise en parallèle des quatre instances permet à elle seule une réduction massive du temps de calcul par rapport à un calcul séquentiel. Au total, 4834 alliages respectant les contraintes de constitution ont été découverts; seuls 221 sont restés Pareto-optimaux.

L'évolution du ratio d'amélioration relatif cumulé, représentée sur la [figure 3.24](#) pour chaque instance — en unité arbitraire (U.A.), semble indiquer que la recherche converge vers un état stationnaire au cours duquel un nombre faible d'individus nouvellement trouvés (comparé à la taille de l'archive) sont assez performants pour dominer des membres de l'archive. Autrement dit, il devient de plus en plus difficile de trouver de meilleurs alliages, ce qui indique la convergence vers un optimum (local ou global).

La [figure 3.24](#) permet également d'observer l'effet du mécanisme d'injection : toutes les 25 générations, une proportion plus importante d'individus domine des membres des archives locales. Les augmentations brusques se situent aux générations suivant l'injection et après mise à jour de l'archive, et non aux générations multiples de 25, ce qui indique que la découverte de nouveaux alliages non-dominés est bien « relancée » dans chaque instance grâce à ce mécanisme.

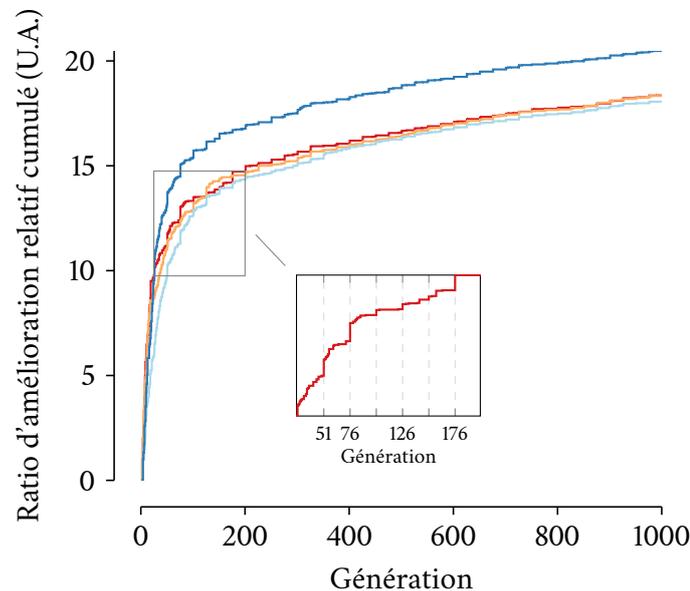


Figure 3.24 — Évolution du ratio d'amélioration relatif cumulé en fonction de la génération, représenté pour chaque instance coopérative (une par couleur).

L'amélioration absolue permet de découpler de la taille de l'archive le nombre d'individus dominants ajoutés à l'archive à la fin de chaque génération. Son évolution cumulée est donnée sur la [figure 3.25](#). Après une première partie à pente élevée, l'évolution semble décélérer, adoptant une croissance proportionnelle à la racine carrée du nombre de générations.

L'optimisation étant bi-objectifs, les résultats sont aisément représentés sous la forme d'un ensemble de Pareto bidimensionnel ([figure 3.26](#)). À des fins de comparaison, le coût des alliages est

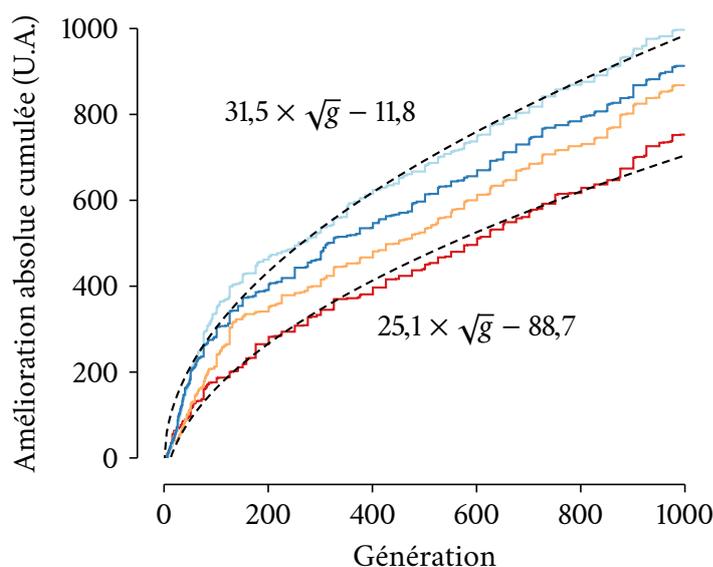


Figure 3.25 — Évolution de l'amélioration absolue cumulée en fonction du nombre de générations représentée pour chaque instance coopérative (une par couleur). Les courbes en pointillés approximent l'évolution des améliorations absolues extrêmes suivant une fonction racine carrée du nombre de générations.

normalisé par rapport au prix du nickel. Chacun des 221 points de la figure 3.26 représente un compromis optimal : parmi eux, aucun alliage ne peut être plus résistant et moins cher.

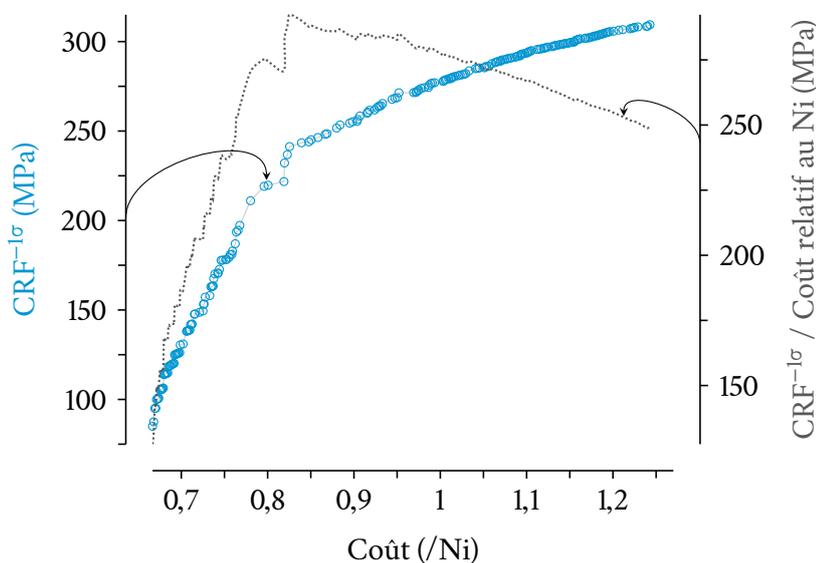


Figure 3.26 — Ensemble de Pareto à l'issue de l'optimisation : la contrainte de rupture par fluage réduite $CRF^{-1\sigma}$ est représentée en fonction du coût normalisé par rapport à celui du nickel. $CRF^{-1\sigma}$ est la contrainte nominale CRF de laquelle a été soustrait l'écart-type de la prédiction issue des processus gaussiens.

La courbe indique que la qualité a un prix : plus un alliage est résistant et plus il est cher, moyennant le respect des contraintes thermodynamiques. L'influence du prix sur la contrainte de rupture par fluage optimale varie : par exemple, une augmentation modérée du prix entre 70 et 80 % de celui du nickel conduit à une forte croissance de la résistance tandis qu'au-delà de 85 % l'amélioration de la résistance au fluage se paie plus cher.

En pratique, l'ensemble de ces alliages n'est peut-être pas pertinent. L'utilisateur final peut notamment imposer un minimum de résistance au fluage, par exemple sous le prétexte qu'une CRF de 100 MPa est insuffisante pour n'importe quelle partie d'une centrale thermique. Le preneur de décision peut également choisir de considérer le ratio CRF/coût (en pointillés sur la [figure 3.26](#)) qui passe par un maximum aux alentours d'un coût relatif de 0,85. En toute rigueur, ce choix doit s'appuyer sur une formalisation d'un cahier des charges ; cet aspect sera développé ultérieurement.

La [figure 3.27](#) représente la concentration optimale des neuf éléments d'addition optimisés en fonction des deux objectifs : $CRF^{-1\sigma}$ (échelle horizontale inférieure) et le coût (échelle horizontale supérieure). Cette représentation à double échelle (l'une étant non-linéaire) est possible du fait de la relation monotone entre les deux objectifs montrée sur la [figure 3.26](#).

L'augmentation du prix est principalement causée par les additions croissantes de cobalt et de tungstène et la diminution de la teneur en fer. Les additions de molybdène et de niobium demeurent faibles, probablement à cause de leur tendance à former des borures et des carbures interdits. La teneur en chrome reste stable à environ 19 %_{mass.}.

Les raisons expliquant l'augmentation de la contrainte de rupture par fluage sont notamment :

- la part globalement grandissante de la phase γ' liée à l'addition croissante d'aluminium, plus rapide que la décroissance de la teneur en titane ;
- l'augmentation des teneurs en carbone et en tungstène ayant tendance à favoriser la formation des carbures $M_{23}C_6$, le tungstène contribuant également au renforcement par solution solide. De manière concomitante, la concentration en chrome augmente significativement autour de 75 % du coût du nickel afin de compenser son épuisement dans la matrice due à la formation de carbures ;
- la substitution graduelle du nickel par le cobalt pour les alliages les plus résistants au fluage, atteignant 21 %_{mass.} pour les plus chers.

Inversement, les alliages peu onéreux et moins résistants ne contiennent ni cobalt, ni tungstène, peu de carbone et seulement la moitié de la fraction molaire de phase γ' des alliages les plus performants.

Ces observations sont en accord avec les connaissances métallurgiques sur la résistance au fluage et la constitution d'alliages. Ceci confirme la capacité de l'algorithme génétique à exploiter les corrélations métallurgiques encodées, implicitement ou explicitement, dans les bases de données de régression et les bases de données thermodynamiques.

Le bon fonctionnement de la méthode de conception ayant été confirmé, il en est fait usage dans deux cas d'optimisation dont le cahier des charges est représentatif de problèmes réels.

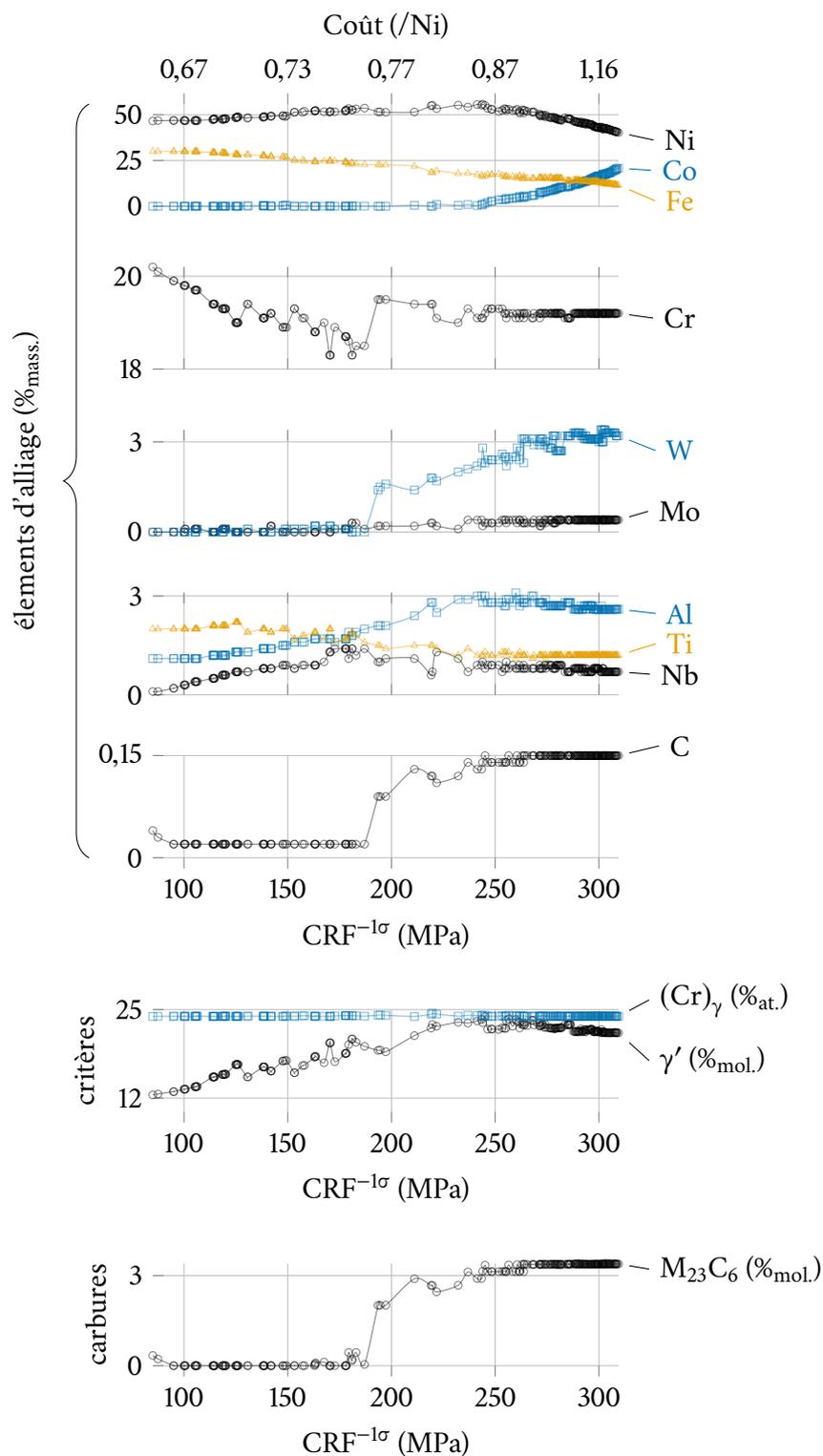


Figure 3.27 — Évolution de la teneur des neuf éléments d'addition optimisés en fonction de la contrainte de rupture par fluage réduite $CRF^{-1\sigma}$ (échelle horizontale inférieure) et du coût des alliages (échelle horizontale supérieure). L'évolution de la fraction de phase γ' , de la concentration en chrome dans la matrice (γ) et du volume molaire de carbures $M_{23}C_6$ est également représentée sur le graphe du bas.

3.7 Optimisation sans aide à la décision : cas industriel

L'algorithme d'optimisation a également été exploité pour concevoir des alliages dérivés d'un superalliage commercial récent, l'alliage AD730. Le cahier des charges de l'optimisation a été établi en partenariat avec l'entreprise Aubert & Duval, productrice de cet alliage; certains détails sont ainsi omis par souci de confidentialité. Il sera intéressant de comparer les résultats de l'optimisation aux caractéristiques de l'alliage AD730, ce dernier ayant lui-même été conçu en faisant appel à des outils informatisés comme la thermodynamique prédictive,⁷⁴ mais pas à la fouille de données ni à une métaheuristique.

3.7.1 Espace de recherche

Les bornes de l'espace de recherche dans lequel sont optimisées les compositions sont listées dans le [tableau 3.13](#); il s'agit de l'espace couvert par le brevet de l'alliage AD730. Le nombre d'alliages contenus dans cet espace s'élève à environ 2×10^{11} ; il faudrait au moins plusieurs années de calcul pour les explorer systématiquement.

TABLEAU 3.13 — Nature des éléments d'alliage et bornes de l'espace de recherche (%_{mass.}).

Éléments	Ni	Co	Fe	Cr	Mo	W	Nb	Al	Ti	C
Bornes	reste	0	0	14	2	1	0,5	1,3	2,5	0,015
Pas	—	11	12	17	5	4	2,5	2,8	4,5	—
						0,1				

3.7.2 Objectifs et contraintes

Le problème d'optimisation comporte quatre objectifs et dix contraintes. Les objectifs sont :

- la maximisation de la résistance à la traction à 750 °C;
- la maximisation de la contrainte de rupture par fluage en 1000 h à 750 °C;
- la minimisation du coût de l'alliage;
- la minimisation de la masse volumique de l'alliage à température ambiante.

De la même manière que précédemment, les alliages sont soumis à des contraintes thermodynamiques qui restreignent les constitutions possibles.

- les alliages doivent être stables en température. Leur constitution peut comprendre la matrice γ , des précipités γ' , des carbures et des borures. À la différence du cas précédent, une faible fraction^a de certaines phases indésirables (Laves, μ , P, R et σ) est tolérée aux températures auxquelles l'équilibre thermodynamique est calculé; les alliages constitués de l'une des autres phases indésirables mentionnées au début de ce chapitre (telle la phase η) sont rejetés;
- la température de solvus^a de γ' $S_{\gamma'}$, c'est-à-dire la température au-delà de laquelle les précipités de la phase γ' se dissolvent, est contrôlée. Cette température doit être suffisamment haute pour que les précipités ne disparaissent pas aux éventuelles températures de service et suffisamment basse pour faciliter le forgeage. En pratique, cette température doit rester « accessible » aux moyens de fabrication conventionnels et ne pas être excessive, le chauffage à la température de mise en solution ou de mise en forme devenant plus long et la fabrication plus coûteuse lorsque cette température augmente;

a. Valeurs confidentielles

- le critère NEW PHACOMP à une température T_3^a doit être respecté : $M_d < M_d^{\max}$;
- la teneur en chrome dans la matrice (γ) doit être suffisante pour assurer la résistance à la corrosion ; celle-ci est vérifiée à T_3 ;
- la fraction molaire de la phase durcissante γ' doit être limitée à une température T_4^a et ne pas dépasser une certaine valeur $X_{\gamma'}^{\max}$.

L'évaluation d'un individu est conduite selon l'organigramme de la [figure 3.28](#). Celle-ci débute avec l'estimation des propriétés thermomécaniques. Si celles-ci permettent l'accès de l'alliage à l'archive, l'évaluation se poursuit avec les contraintes de constitution. Un premier équilibre calculé à la température de solvus maximale admissible permet de s'assurer de la dissolution complète de la phase γ' . Le cas échéant, l'équilibre est calculé à la température de solvus minimale admissible afin de déterminer la proportion de la phase γ' ; sa présence indique que le solvus se situe bien dans l'intervalle de température désiré.

Une fois vérifié que le solvus se trouve bien dans la gamme de température souhaitée, l'équilibre à 700 °C est calculé ; la quantité de chrome libre et la valeur du critère M_d sont contrôlées. Enfin, la proportion de phase durcissante est vérifiée à 600 °C suite à un dernier calcul d'équilibre. À toutes ces températures, la proportion de phases indésirables (F_{PI}) est déterminée et conditionne le calcul de l'équilibre suivant.

De manière similaire à la première optimisation, les individus ne respectant pas une des contraintes ne sont pas totalement vérifiés afin de réduire le nombre de calculs d'équilibre thermodynamique. Une pénalité est affectée aux objectifs n'ayant pas été calculés (cf. [figure 3.23](#)) ; cette pénalité est choisie de façon à disqualifier l'individu lors des sélections dans l'algorithme génétique.

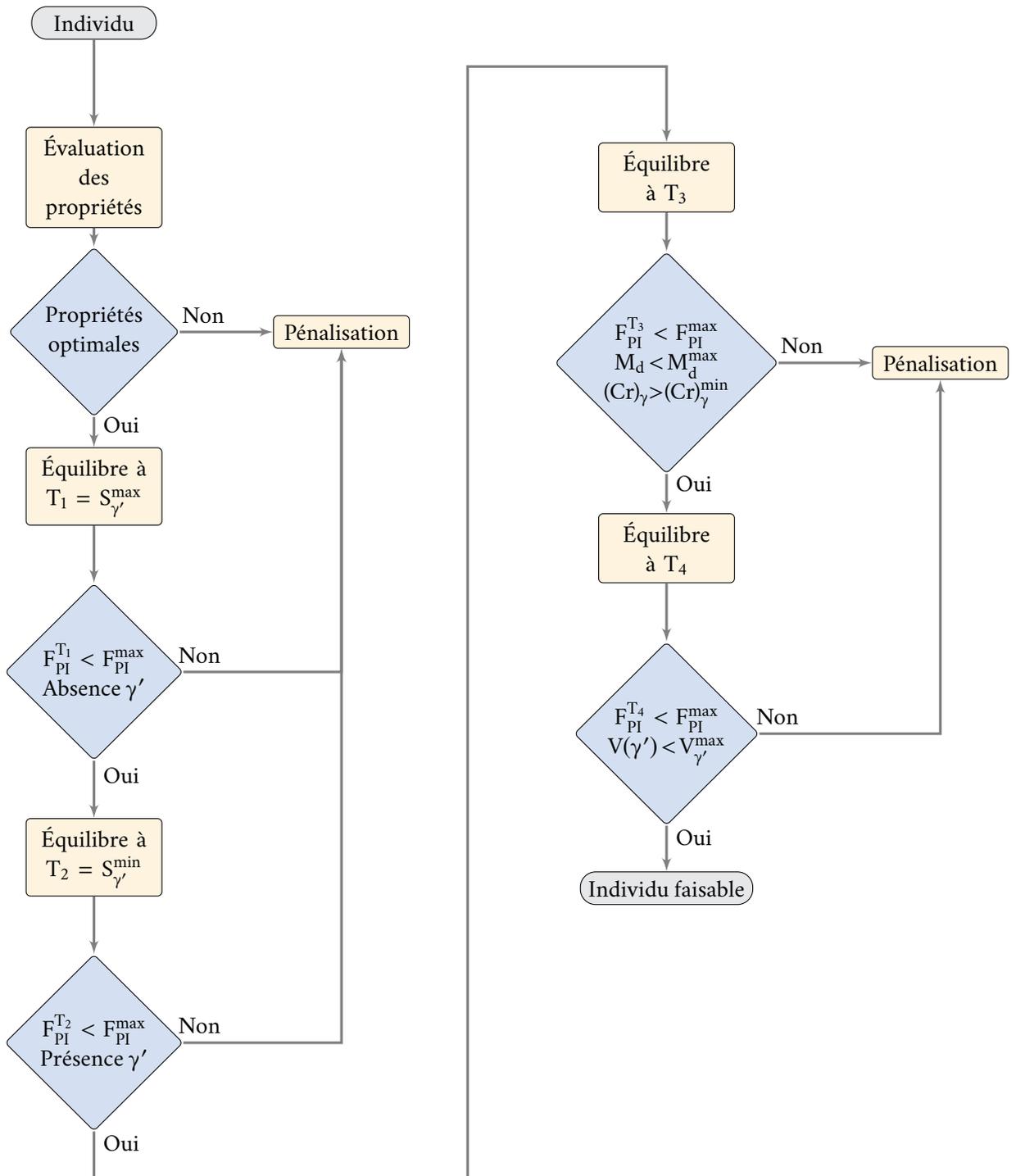


Figure 3.28 — Organigramme d'évaluation des objectifs et des contraintes d'un individu. $S_{\gamma'}^{\max}$ et $S_{\gamma'}^{\min}$ représentent respectivement les températures maximales et minimales de solvus de la phase γ' et $V_{\gamma'}^{\max}$ sa fraction molaire maximale à T_4 . F_{PI}^{\max} désigne la fraction molaire maximale tolérée de phases indésirables à toute température.

3.7.3 Résultats

L'évaluation de 1,43 millions d'alliages *via* 1,96 millions de calculs d'équilibre thermodynamique a conduit à l'obtention de 3987 alliages optimaux après 111 h (~5 jours). L'évolution du ratio d'amélioration relatif semble indiquer la convergence vers un optimum (figure 3.29) : il devient en effet de plus en plus difficile de trouver un nombre important d'alliages surpassant les alliages optimaux de l'archive.

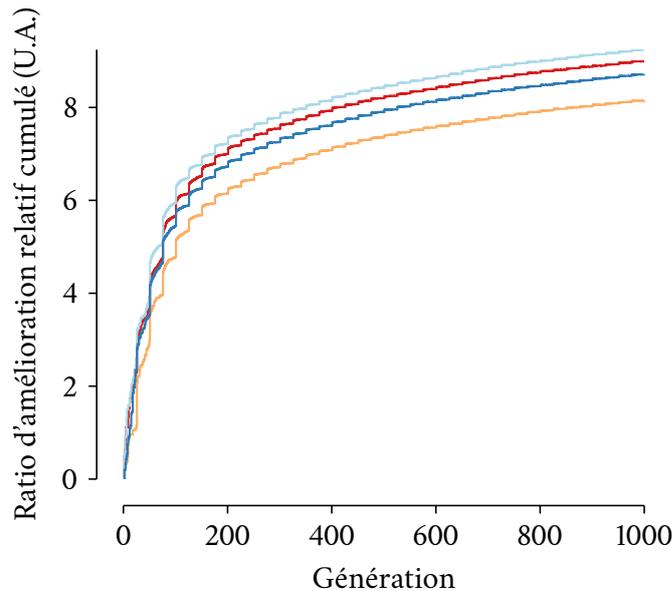


Figure 3.29 — Évolution du ratio d'amélioration relatif cumulé en fonction de la génération, représenté pour chaque instance coopérative (une par couleur).

Du fait du grand nombre d'objectifs, les résultats sont difficilement représentables : le front de Pareto est en effet un hypervolume à quatre dimensions. À la place, des histogrammes montrant la répartition des milliers de solutions pour chaque objectif sont présentés sur la figure 3.31.

La maximisation des propriétés semble avoir été accomplie par l'algorithme d'optimisation au vu de la figure 3.31, sur laquelle les alliages à forte résistance à la traction et au fluage sont présents en grand nombre. Leur prix est systématiquement supérieur à celui du nickel, du fait notamment de l'ajout de cobalt, de molybdène et de tungstène (figure 3.30), tandis que leur masse volumique est toujours inférieure (celle du nickel est $8,91 \text{ g.cm}^{-3}$).

La gamme de composition des alliages optimaux est présentée sur la figure 3.30 : les teneurs en niobium, en aluminium et en titane sont fixes pour au moins trois quarts d'entre eux, tandis que ~60 % possèdent entre 3 et 4 %_{mass.} de molybdène et ~80 % entre 1 et 1,75 %_{mass.} de tungstène. La teneur en chrome est principalement comprise entre 15 et 15,5 %_{mass.}. Les additions de cobalt et de fer sont plus diverses, s'étendant sur quasiment toute leur gamme possible. L'usage du cobalt semble homogène sur celle-ci alors que le fer est majoritairement ajouté à hauteur de 2 à 4 %_{mass.}. Le nickel est présent quasi-exclusivement entre 60 et 65 %_{mass.}.

Ces observations expliquent en partie les propriétés obtenues : les alliages optimaux sont généralement chargés en éléments formeurs de γ' (Al, Ti) et en éléments renforçant par solution solide (Mo, W, Nb), sans oublier la participation du carbone (0,015 %_{mass.}) par l'intermédiaire des carbures.

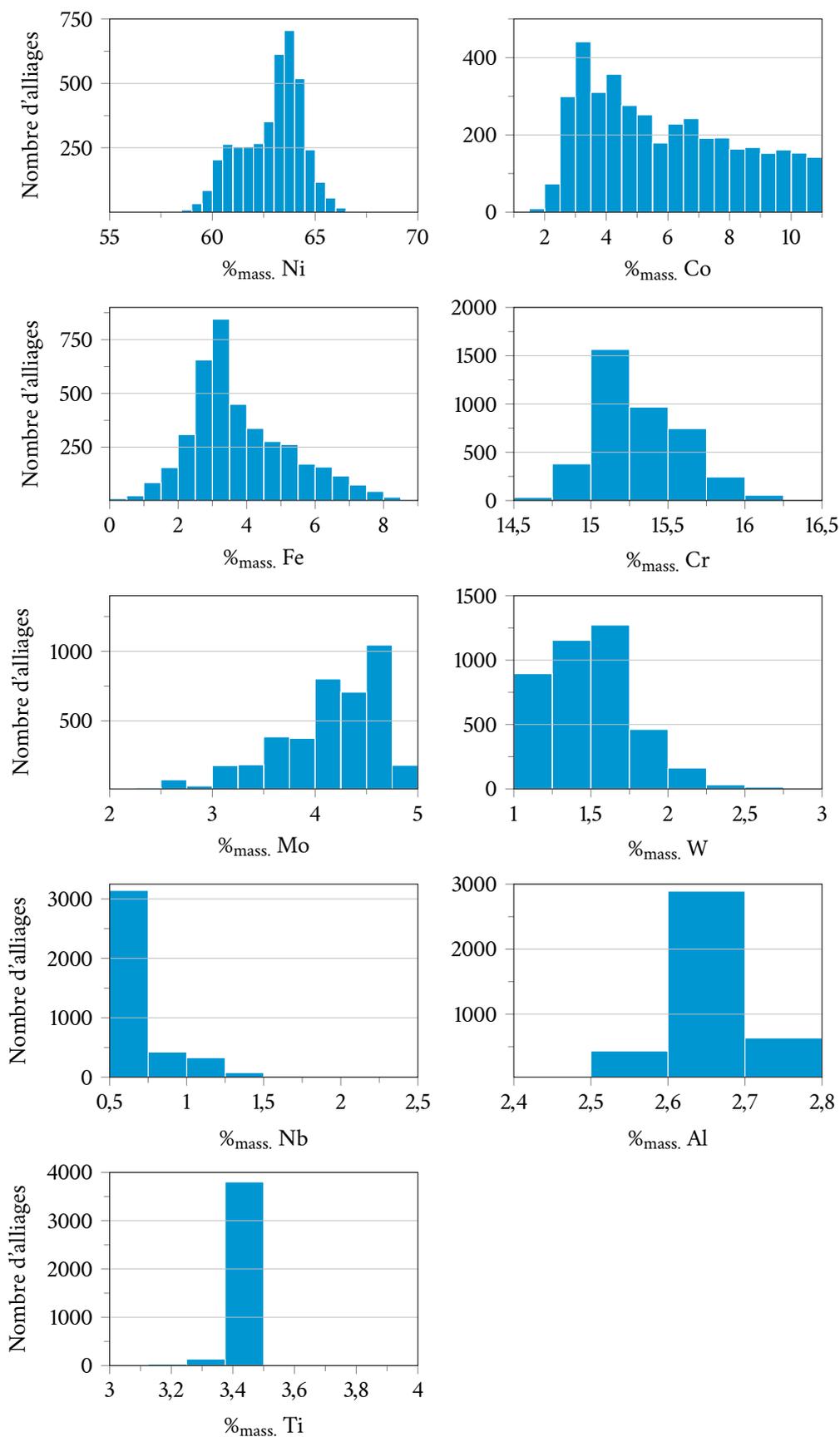


Figure 3.30 — Distribution des éléments d'addition des alliages optimaux.

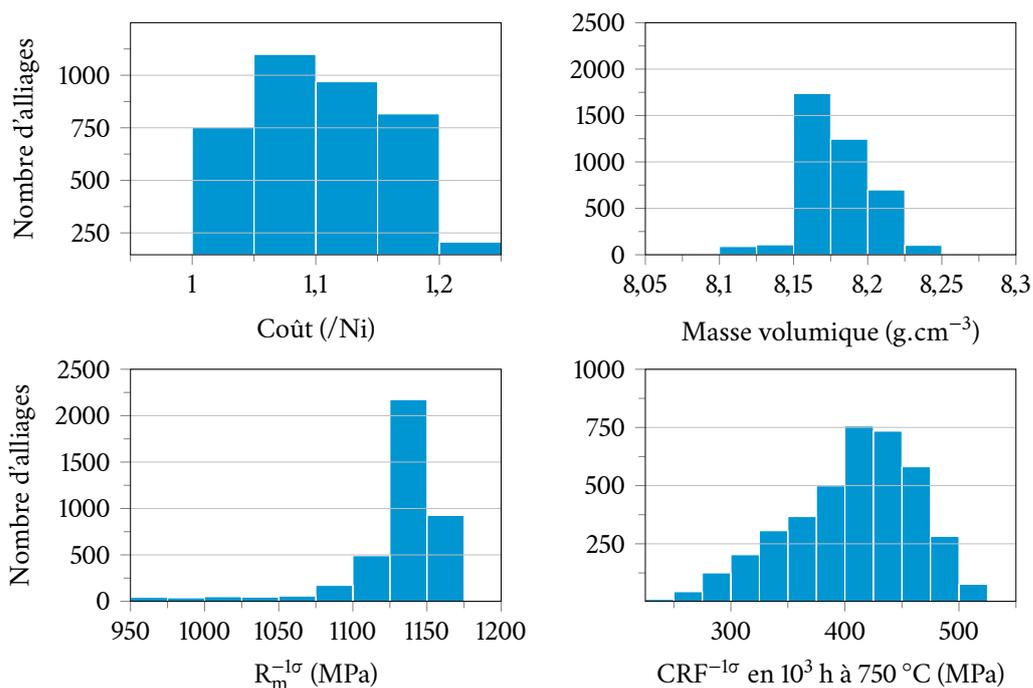


Figure 3.31 — Distribution des alliages optimaux en fonction des objectifs.

3.7.4 Sélection d'alliages pour fabrication

Trois alliages optimaux respectant l'ensemble des contraintes de constitution ont été sélectionnés pour être fabriqués. Le choix a été conduit « manuellement » avec l'assistance d'Aubert & Duval.

Certaines caractéristiques des alliages choisis — nommés ALT 730 I, ALT 730 II et ALT 730 III — sont listées dans le [tableau 3.14](#) (les compositions sont confidentielles). Les alliages ALT 730 I et II sont aussi coûteux que l'alliage de référence AD730 mais pourraient posséder des propriétés mécaniques supérieures. L'alliage ALT 730 III représente le compromis inverse : ses propriétés sont comparables mais son prix plus faible.

TABLEAU 3.14 — Propriétés nominales et « réduites », masse volumique et coût relatif de l'AD730 et des alliages optimaux sélectionnés pour fabrication ALT 730 I, II et III.

	R _m (MPa)	R _m ^{-1σ} (MPa)	CRF (MPa)	CRF ^{-1σ} (MPa)	Masse volumique (g.cm ⁻³)	Coût relatif
ALT 730 I	1206	1146	504	432	8,16	1
ALT 730 II	1170	1112	666	452	8,25	1
ALT 730 III	1157	1099	522	419	8,18	0,88
AD730	1143	1100	430	405	8,24	1

3.7.5 Résultats préliminaires de la validation expérimentale

Des barreaux de 190 × 110 × 80 mm ont été extraits de pions fabriqués, homogénéisés puis filés par Aubert & Duval. Des échantillons ont été prélevés de ces barreaux pour analyse métallographique préliminaire. Les échantillons des différents alliages ont tous été traités thermiquement afin d'obtenir un état similaire ; ainsi un premier traitement d'homogénéisation à 1200 °C pendant 3 h a été suivi d'un recuit de vieillissement de 16 h à 730 °C. Ce traitement est similaire à certains reportés

sur l'AD730.^{74,209} Cependant, une température de 1200 °C, très supérieure au solvus γ' des alliages, a été choisie de manière à s'assurer de leur bonne homogénéisation.

La composition des alliages a été vérifiée par analyse par spectroscopie dispersive en énergie (EDS — 20 kV, distance de travail de 8 mm) et les écarts à la composition nominale calculés (tableau 3.15). Les compositions sont globalement proches de celles désirées.

TABLEAU 3.15 — Écarts à la composition nominale des alliages fabriqués ALT 730 I, II et III ainsi que de l'alliage de référence AD730, tels que déterminés par EDS (en %_{mass.}). Une valeur positive signifie que la teneur est plus importante que prévue.

	Ni	Co	Fe	Cr	Mo	W	Nb	Al	Ti
ALT 730 I	-2,7	-0,1	0,2	0,5	0,5	0,2	0,2	-0,3	0,2
ALT 730 II	-1,4	-0,1	0,2	0,3	0,5	0,4	0,1	-0,2	0,3
ALT 730 III	-1,1	-0,1	0	0,5	0,4	0,4	0,2	-0,3	0,2
AD730	-1,2	0	0,2	0,4	0,3	0,6	0,1	-0,3	-0,1

La diffractométrie de rayons X (DRX) avec la raie K_{α} du cuivre a été exploitée pour étudier la constitution des alliages traités thermiquement (figure 3.32). Les diagrammes ne montrent pas d'autres pics de diffraction que ceux caractéristiques des phases γ et γ' ; plus particulièrement, aucune phase TCP ne semble être présente.

Le traitement thermique a conduit à une microstructure à gros grains. Par conséquent, les résultats de diffraction manquent de représentativité : certains diffractogrammes sont « bruités », et les hauteurs des pics sont variables.

La microdureté Vickers des superalliages a également été mesurée sous une charge de 0,5 kg (4,9 N). Les résultats moyens de dix mesures sont présentés dans le tableau 3.16 en HV_{0,5} et en GPa. La microdureté des alliages ALT 730 I, II et III, proche de celle de l'AD730, pourrait impliquer une limite d'élasticité similaire (en vertu de la relation approximative $\sigma_y \approx HV/3$).

TABLEAU 3.16 — Microdureté des alliages fabriqués ALT 730 I, II et III ainsi que de l'alliage AD730.

	ALT 730 I	ALT 730 II	ALT 730 III	AD730
Microdureté (HV _{0,5})	445 ± 22	459 ± 10	470 ± 24	450 ± 15
Microdureté (GPa)	4,36 ± 0,22	4,50 ± 0,10	4,61 ± 0,24	4,41 ± 0,15
$\sigma_y \approx HV/3$ (MPa)	1450 ± 75	1500 ± 35	1540 ± 80	1470 ± 50

Des caractérisations supplémentaires sont nécessaires afin de compléter ces premières observations concernant la microstructure et les propriétés. En particulier, des essais de fluage sont prévus.

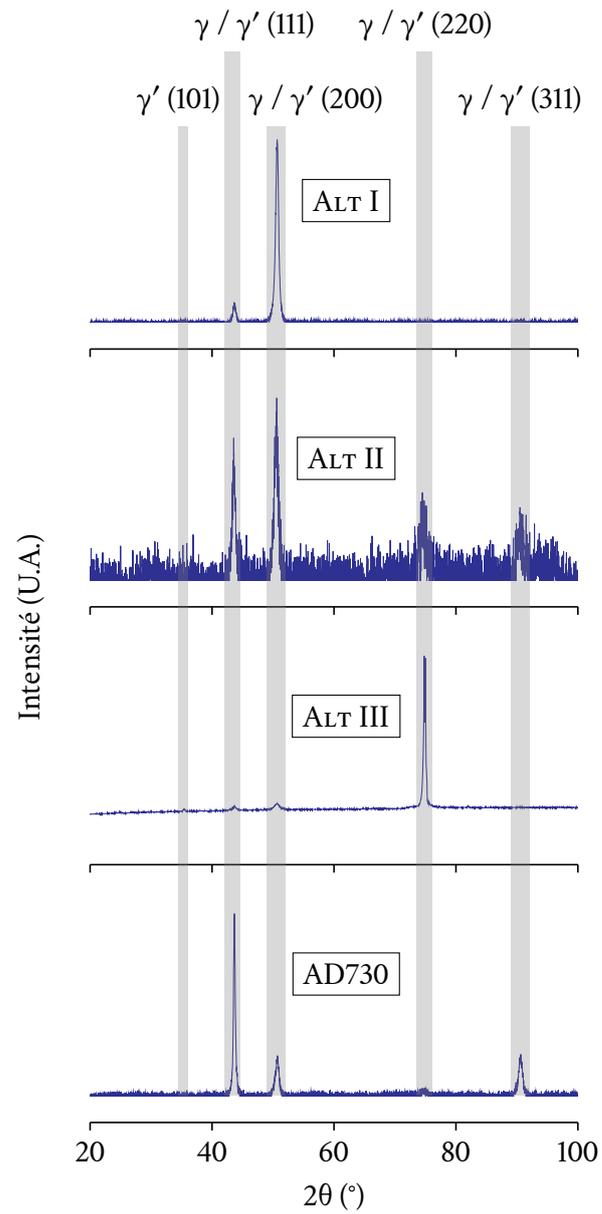


Figure 3.32 — Diffractogrammes des alliages ALT 730 I, II, III et AD730 à l'issue du traitement thermique.

3.8 Optimisation avec aide à la décision *a posteriori*

Le cas d'optimisation abordé dans cette section a pour but de découvrir des compromis compétitifs pour des applications dans des centrales thermiques. Sur le plan méthodologique de la conception d'alliages, il présente entre autres deux différences notables par rapport au cas exposé précédemment. Ce dernier portait en effet sur un domaine de compositions assez restreint puisque couvert par le brevet d'une nuance particulière d'alliage; le cahier des charges en matière d'objectifs était également assez strict. Ainsi, malgré un espace des objectifs à quatre dimensions (résistance en traction, résistance au fluage, coût et masse volumique) et une population optimisée riche de plusieurs milliers d'alliages, le choix « manuel » *a posteriori* de quelques nuances prometteuses ne présentait pas de difficulté majeure puisqu'il s'agissait de comparer les candidats potentiels à la nuance nominale de l'alliage AD730, faisant évidemment elle-même partie du domaine de composition exploré. Le cas étudié ci-après vise au contraire à explorer un domaine de composition plus étendu — ou plus « libre » car non contraint par un brevet — afin de proposer des concurrents à des superalliages commerciaux existants, compétitifs sur un plus grand nombre d'objectifs simultanément (espace des objectifs de dimension six au lieu de quatre), mais pour des cahiers des charges qui peuvent être différents selon les pièces ou les applications visées. La difficulté que peut représenter une sélection « manuelle » dans ce contexte sera mise en évidence, et la performance d'un outil d'aide à la décision sera évaluée et discutée.

3.8.1 Espace de recherche

L'espace de recherche est identique à celui du cas d'optimisation illustratif de la [section 3.6 \(tableau 3.17\)](#) et est constitué de plus de 10^{16} combinaisons.

TABLEAU 3.17 — Nature des éléments d'alliage et bornes de l'espace de recherche (%_{mass.}).

Éléments	Ni	Co	Fe	Cr	Mo	W	Nb	Al	Ti	C	B
Bornes	reste	0 21	0 30	15 25	0 2	0 6	0 5	0 5	0 5	0 0,15	0,005
Pas	—				0,1					0,01	—

3.8.2 Objectifs et contraintes

Les contraintes de constitution sont identiques au cas illustratif : les alliages ne doivent être constitués que de phase γ , γ' et $M_{23}C_6$ à 700 et 750 °C avec, à 750 °C, un maximum de 25 %_{mol.} de phase γ' et un minimum de 24 %_{at.} de chrome dans la matrice γ . Les objectifs de l'optimisation sont :

- la maximisation de la résistance à la traction réduite $R_m^{-1\sigma}$, de la limite d'élasticité réduite $R_e^{-1\sigma}$ et de la contrainte de rupture par fluage réduite $CRF^{-1\sigma}$;
- la minimisation de la valeur absolue du désaccord paramétrique δ entre les phases γ et γ' :

$$\delta = 2 \frac{a_{\gamma'} - a_{\gamma}}{a_{\gamma'} + a_{\gamma}} \quad (3.14)$$

- la minimisation de l'intervalle de température de fragilité (BTR).

La détermination du BTR impose une longue série de calculs thermodynamiques (typiquement plusieurs centaines — cf. algorithme décrit sur la [figure 3.2](#)) prenant chacun une trentaine de millisecondes (dans un système tel que celui du [tableau 3.17](#)). Pour économiser du temps, le BTR n'est pas calculé pour tous les alliages. Il est déterminé seulement pour les alliages optimaux de l'archive

globale lorsque sa taille dépasse celle de la population (ici, 500 individus). Le cas échéant, les individus injectés dans les populations locales sont sélectionnés par ordre croissant de BTR au lieu d'être choisis aléatoirement. Ce mécanisme conduit à la minimisation indirecte du BTR car les gènes des alliages de faible BTR tendent à être favorisés parmi des alliages respectant tous les critères de constitution. Cette sélection supplémentaire, étant conduite sur des alliages par ailleurs optimaux, ne génère qu'un biais minime dans le cadre de l'optimisation multiobjectifs globale. Le reste de l'évaluation d'un individu se déroule identiquement au cas illustratif de la [section 3.6](#).

3.8.3 Résultats

L'algorithme a atteint 1000 générations après 310 h de calcul (environ deux semaines) durant lesquelles environ 1,46 millions d'alliages ont été évalués et 23,54 millions de calculs d'équilibre thermodynamique effectués, dont 1,24 dédiés aux contraintes de constitution et 22,30 au calcul du BTR. L'archive finale contient 5669 alliages Pareto-optimaux trouvés parmi les 55 059 alliages faisables évalués. Les calculs thermodynamiques ont pris 87 % du temps d'optimisation total, dont 82 % pour le seul BTR, ce dernier n'étant pourtant calculé que sur une fraction restreinte des alliages évalués. Les mécanismes d'évaluation partielle ont permis d'effectuer en moyenne 60 % de calculs en moins, ce qui représente un gain de temps d'environ 50 %. De plus, si les évaluations n'avaient pas été conduites parallèlement sur quatre instances, le temps d'optimisation aurait pu être multiplié au maximum par un facteur quatre. En d'autres termes, l'évaluation de 1,46 millions d'alliages en série et sans mécanisme d'évaluation paresseuse aurait nécessité plus de 2000 h, c'est-à-dire plus de trois mois.

L'évolution du ratio d'amélioration relatif semble ici encore indiquer la convergence vers un optimum ([figure 3.33](#)).

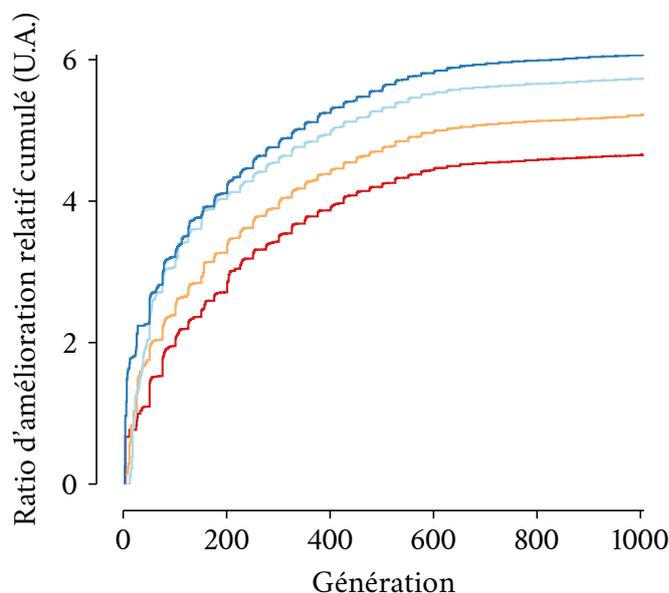


Figure 3.33 — Évolution du ratio d'amélioration relatif cumulé en fonction de la génération, représenté pour chaque instance coopérative (une par couleur).

Les résultats sont difficilement représentables du fait du grand nombre d'objectifs. À la place, des histogrammes illustrant la répartition des milliers de solutions pour chaque objectif sont présentés sur la [figure 3.34](#). Ces histogrammes montrent que la méthode d'optimisation a porté ses fruits : globalement, les alliages possédant de fortes propriétés mécaniques et des BTR peu élevés sont en

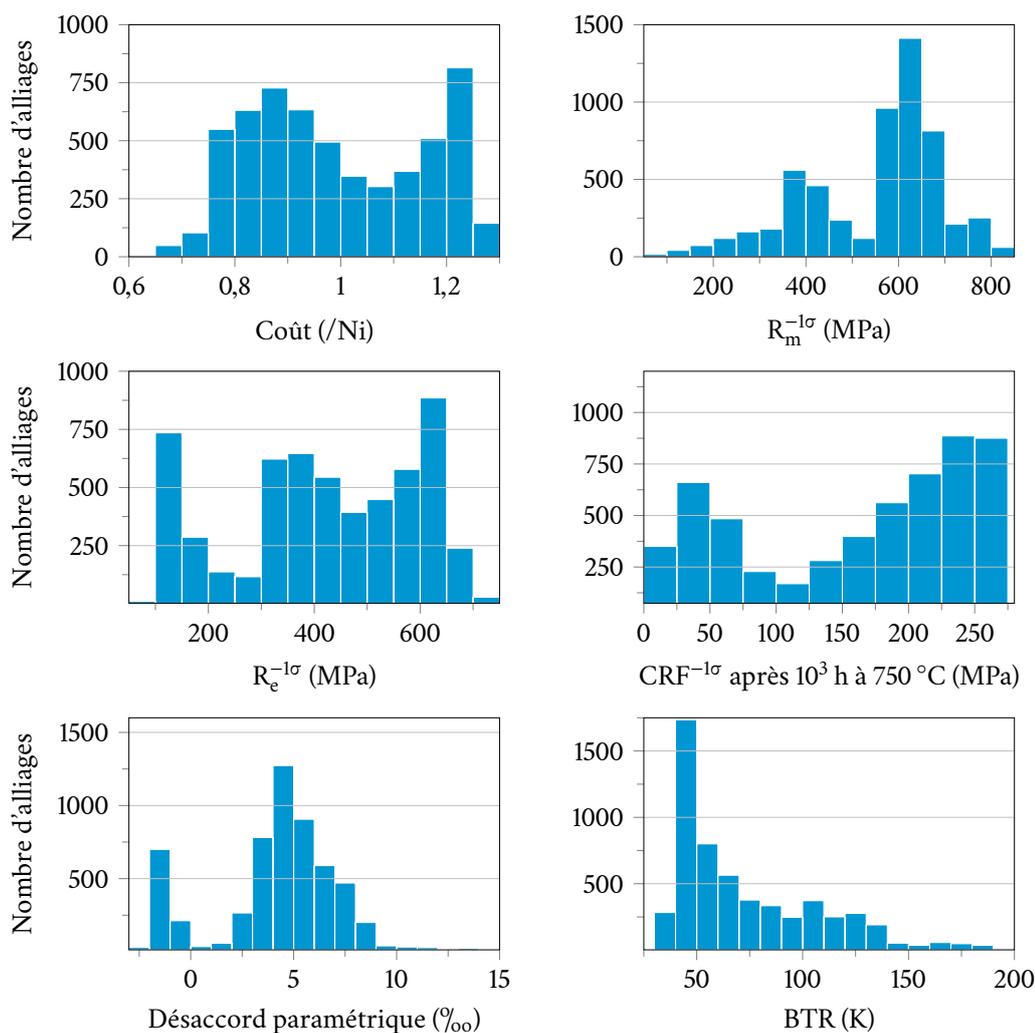


Figure 3.34 — Distribution des alliages optimaux en fonction des objectifs.

plus grand nombre. La cible nulle du désaccord paramétrique semble avoir été approchée à la fois des côtés positif et négatif, traduisant l'expression mathématique du critère sous forme de valeur absolue. L'historgramme du prix indique une tendance à favoriser deux populations d'alliages peu onéreux ($\pm 85\%$ du coût du nickel) ou plutôt chers ($\pm 120\%$); il sera vu par la suite que ce comportement a peu de conséquences.

La [figure 3.35](#) représente la répartition des alliages selon leur proportion de phase γ' et la concentration atomique en chrome dans leur matrice (γ). La figure indique que la plupart des alliages sont constitués de 20 à 25 %_{mol.} de γ' mais qu'il existe également 975 alliages n'en possédant pas. Cette seconde population est séparée de la première par seulement une centaine d'alliages ayant des teneurs intermédiaires en γ' . Ces alliages dont la teneur en chrome et en fer est plus élevée se retrouvent sur la [figure 3.36](#); logiquement, ils possèdent une faible quantité d'aluminium et de titane (entre 0 et 0,5 %_{mass.}). Par ailleurs, la majeure partie des alliages ne possèdent que le minimum requis de chrome libre; peu dépassent les 25 %_{at.}. Ceci témoigne indirectement de la performance de l'optimisation qui parvient à adapter au plus juste la proportion de chrome en évitant la formation de phases indésirables.

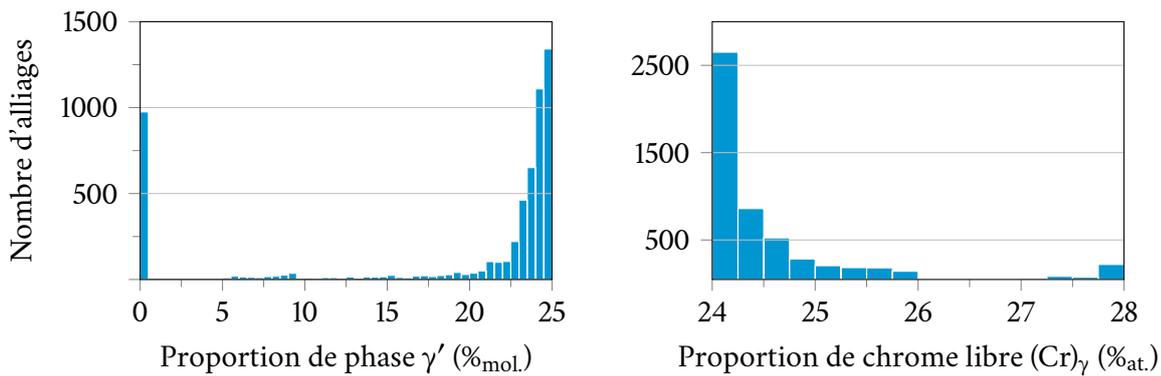


Figure 3.35 — Distribution des alliages optimaux en fonction de la valeur des contraintes.

La distribution des éléments d'addition dans les alliages optimaux est illustrée sur la [figure 3.36](#). De manière générale :

- la plupart des alliages sont alliés à hauteur de 45-55 %_{mass.}, certains seulement à hauteur de ~40 %_{mass.} ;
- toute la gamme du cobalt est utilisée même si de faibles additions semblent préférées. Néanmoins, à 20 %_{mass.}, le cobalt représente le deuxième élément d'addition dans environ 500 alliages ;
- à l'inverse, les alliages possédant plus de 15 %_{mass.} de fer sont minoritaires. En outre, très peu d'alliages présentent des additions de 15-20 %_{mass.} et de 25 %_{mass.} ;
- la teneur en chrome demeure dans la gamme 19-20 %_{mass.}, quelques centaines d'alliages seulement en possédant plus de 21 %_{mass.} ;
- le molybdène est peu ajouté, probablement à cause de sa tendance à former des phases non souhaitées ;
- bien que la moitié des alliages optimaux contiennent moins de 1 %_{mass.} de tungstène, ce dernier peut être ajouté en des quantités qui atteignent quasiment sa borne supérieure. Ainsi, près de 4 %_{mass.} de tungstène sont ajoutés dans certains alliages ;
- les additions de niobium restent faibles parce qu'il favorise la formation de phases ici indésirables (carbures NbC, phase δ) ;
- le recours à l'aluminium est notable, sa teneur étant principalement comprise entre 3 et 4 %_{mass.} ;
- la concentration de titane est soit en deçà de 0,5 %_{mass.} dans un millier d'alliages, soit entre 1 et 1,5 %_{mass.} dans la plupart des autres ;
- le carbone est très employé entre 0,1 et 0,15 %_{mass.} (sa borne supérieure), plus rarement en deçà.

Encore une fois, les propriétés des alliages semblent corroborer leur constitution, elle-même en adéquation avec leur chimie.

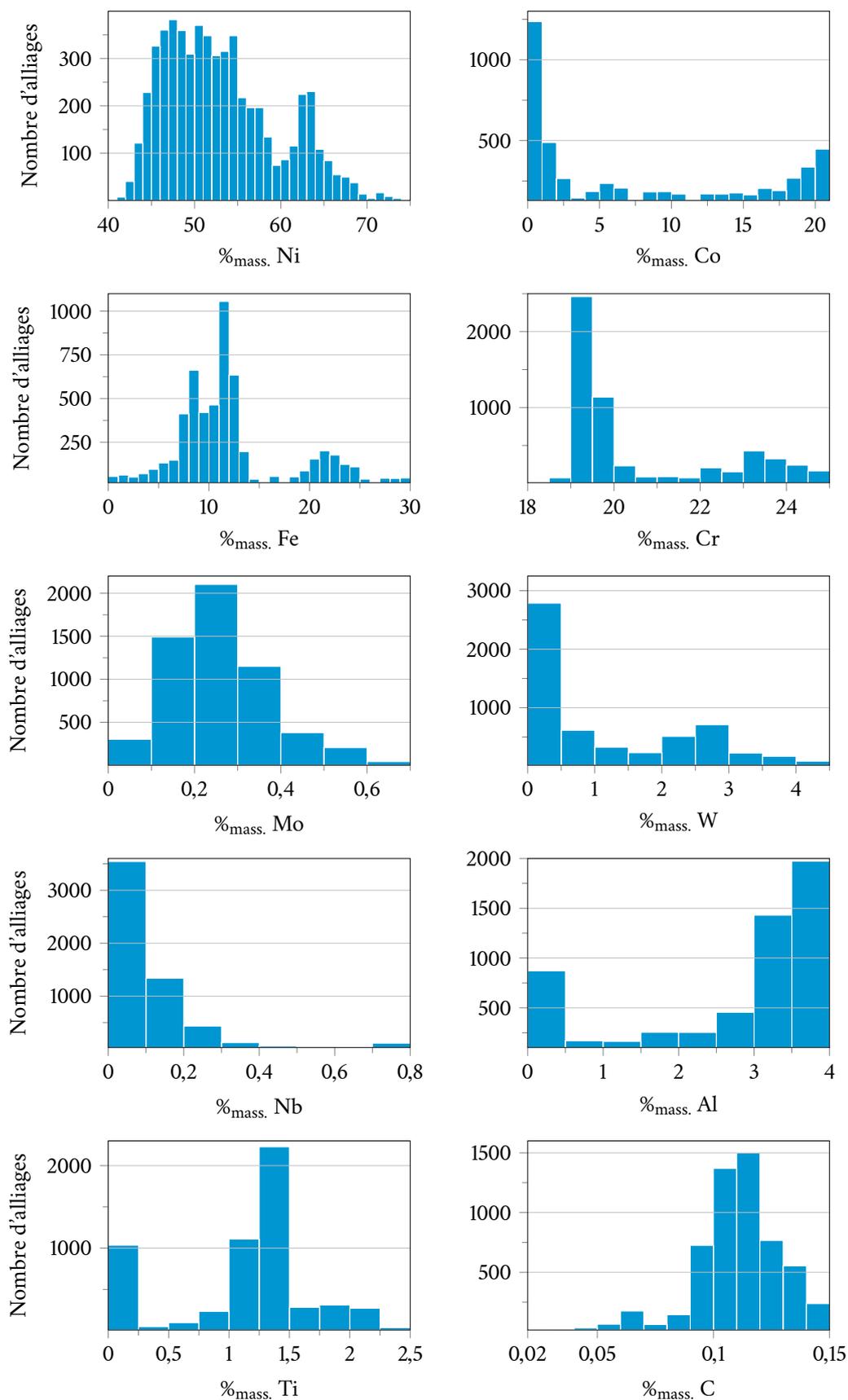


Figure 3.36 — Distribution des éléments d'addition des alliages optimaux.

3.8.4 Performances de l'algorithme

L'augmentation du nombre d'objectifs par rapport au cas illustratif ne semble pas dégrader significativement la capacité d'optimisation pratique de l'algorithme. En effet, l'évolution croissante du ratio d'amélioration (figure 3.33) dénote de la capacité de l'algorithme d'optimisation à trouver continuellement de nouveaux individus dominants éliminant de l'archive des individus dominés.

Pourtant, le nombre d'objectifs plus important conduit à l'augmentation de la proportion d'individus non-dominés de l'espace de recherche²¹⁰ irrémédiablement suivie de l'augmentation de la proportion d'individus non-dominés dans la population.²¹¹ En effet, la Pareto-optimalité définit un individu comme étant optimal (ou non-dominé) s'il est meilleur que les autres membres de la population sur au moins un des objectifs; augmenter le nombre d'objectifs revient à accroître le nombre de dimensions dans lesquelles un individu peut être meilleur, donc à accroître le nombre de possibilités d'optimalité. Farina & Amato²¹⁰ ont ainsi estimé que la croissance attendue de la proportion e d'individus non-dominés dans un espace à m dimensions (objectifs) suit la relation :

$$e = \frac{2^m - 2}{2^m} \quad (3.15)$$

Pour deux objectifs, $e \simeq 50\%$; pour quatre, $e \simeq 87,5\%$. Pour un grand nombre d'objectifs, il est attendu que pratiquement tous les individus de l'espace de recherche soient optimaux au sens de Pareto; ainsi, n'importe quel individu tiré au hasard aurait de grandes chances d'être optimal.

La croissance résultante du nombre d'individus non-dominés dans la population a également été illustrée par Ishibuchi *et al.*,²¹¹ via le tracé de l'évolution de leur quantité en fonction du nombre d'objectifs (figure 3.37). Les 200 vecteurs objectifs servant au tracé de cette figure ont été générés aléatoirement dans l'espace des k objectifs. Cet échantillonnage incomplet de l'espace des objectifs ne permet pas de retrouver strictement la précédente relation; cependant, le constat demeure identique.

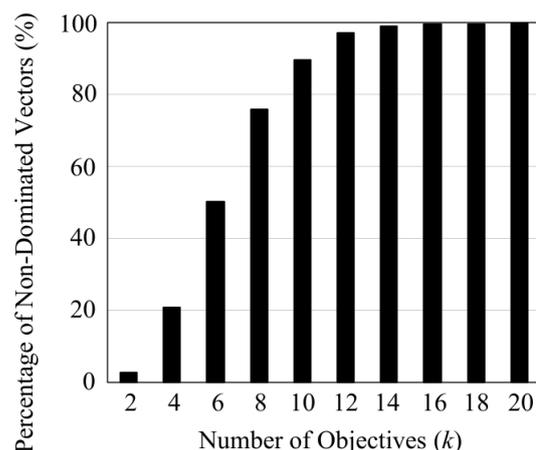


Figure 3.37 — Pourcentage d'individus non-dominés dans une population de 200 individus dont les vecteurs objectifs ont été générés aléatoirement dans un espace à k dimensions.²¹¹

Toutefois, dans le cas présent, alors que les individus non-dominés de la population (et donc de l'archive) de l'ancienne génération devraient être privilégiés au changement de génération, l'évolution croissante du ratio d'amélioration (figure 3.33) montre que ces individus sont régulièrement éliminés. De nouveaux individus « plus » dominants sont donc trouvés malgré la place supposément faible qui leur est laissée.²¹² Ces individus dominés devraient être en nombre très largement inférieur si la recherche procédait de manière purement stochastique sans optimisation effective.

D'un point de vue pragmatique, la procédure d'optimisation a permis d'obtenir des résultats présentant un intérêt dans le cadre des applications envisagées. Les caractéristiques des alliages de l'archive finale sont variées. Par exemple, la [figure 3.34](#) montre que les gammes de résistance à la traction, de limite d'élasticité et de contrainte de rupture par fluage couvrent chacune plusieurs centaines de mégapascals. Les valeurs de désaccord paramétrique varient du simple au double et celles du BTR du simple au quadruple (soit plusieurs centaines de degrés Kelvin). La gamme de coût des alliages optimaux est également large ($\pm 30\%$ du prix du nickel) et traduit la diversité des compositions illustrée sur la [figure 3.36](#). Cette figure montre qu'à l'exception du niobium, un minimum de 50 % des valeurs possibles de chaque gène est présente dans au moins un alliage; en moyenne, cette représentativité atteint 70 % des valeurs possibles. Cette variété met en évidence le pouvoir exploratoire de l'algorithme de recherche.

De surcroît, il sera montré dans la section suivante qu'une partie importante des alliages obtenus à l'issue de l'optimisation présente des propriétés supérieures à celles d'alliages commerciaux de dernière génération tels l'Inconel 740H ou le Haynes 282; l'optimisation simultanée de plusieurs propriétés semble ainsi avoir été correctement menée.

Néanmoins, il est à noter l'existence d'une proportion importante de doublons au sein de la population ([figure 3.38](#)). La présence de doublons est notamment une conséquence « naturelle » de l'élitisme de l'algorithme qui impose la conservation des meilleurs individus pendant plusieurs générations. L'augmentation de cette proportion peut être un indicateur « d'épuisement » du potentiel de la population. En effet, si l'algorithme d'optimisation peine à trouver de nouveaux individus dominant une partie de la population, il aura tendance à reconduire les doublons dans la génération suivante à défaut de disposer de nouveaux individus plus performants.

L'évolution de la proportion de doublons dans la population à la génération suivante l'injection de membres de l'archive tend à confirmer cet « épuisement ». À noter que passée la génération 75, la régénération de la population est complète : toute la population est recrée à partir d'individus de l'archive. Pendant les quatre cents premières générations, les populations post-régénération et transformation (reproduction et mutation) présentent un nombre de doublons inférieur à la moyenne de 46 %. Cette diminution va de pair avec une augmentation de la diversité dans la population; autrement dit, la régénération de la population avec des membres de l'archive servant de « bons » parents permet la découverte d'individus non-dominés plus intéressants — s'ils ne l'étaient pas, les parents seraient conservés et le nombre de doublons stagnerait ou augmenterait.

En revanche, après quatre cents générations, la proportion de doublons augmente à l'issue des transformations sur la population régénérée (cf. courbe rouge sur la [figure 3.38](#)). Cette augmentation signifie qu'un nombre plus important de parents est reconduit à la génération suivante; l'injection d'individus de l'archive ne semble donc plus permettre la création d'enfants plus performants. Cette observation complète les précédentes indications de convergence.

L'importante proportion de doublons provient également de la façon d'opérer les transformations. Étant donnée la probabilité de reproduction p_c , un individu sélectionné par tournoi a $p_c\%$ de chance de servir de parent, c'est-à-dire d'avoir ses gènes hybridés. Un individu a donc $(100 - p_c)\%$ de chance de ne pas être modifié à l'issue de la reproduction. Dans les optimisations précédentes, cette chance s'élève à 30 % — en moyenne 150 des 500 parents restent donc inchangés.

Il reste qu'une proportion trop importante de doublons entrave la recherche puisqu'en pratique une partie de la population ne peut pas contribuer à l'exploration de l'espace des possibles. Après avoir constaté l'importante proportion de doublons au sein de la population, il a été décidé de contrôler la fraction de doublons au cours des optimisations. Ainsi, une proportion maximale

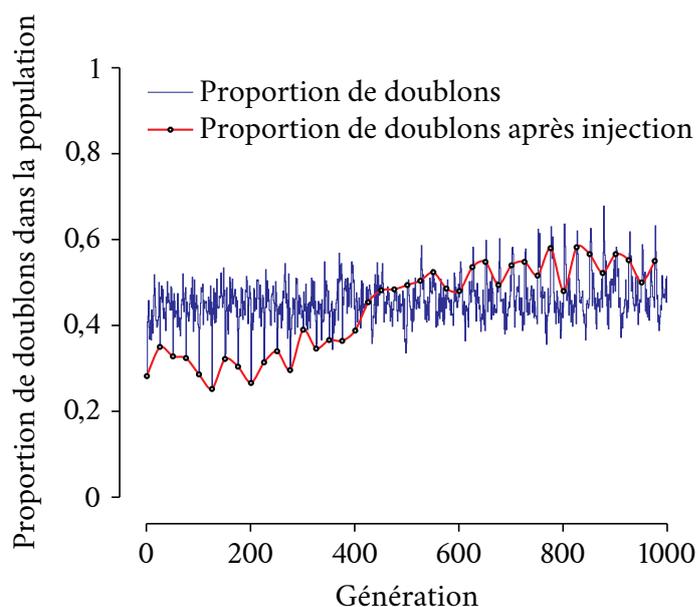


Figure 3.38 — Proportion de doublons dans la population. La courbe rouge reprend les points de la courbe bleue à intervalle régulier et décrit la proportion de doublons à la génération suivant l’injection de membres de l’archive dans la population.

de doublons sera exploitée dans le [chapitre 4](#) comme critère déclenchant la régénération de la population à partir de l’archive. Ce mécanisme sera rediscuté dans le chapitre suivant.

3.8.5 Sélection multicritères manuelle

Cette section illustre la possibilité de sélectionner « manuellement » (par comparaison) des alliages performants parmi les 5669 compromis de l’ensemble de Pareto. Les alliages servant de base aux comparaisons ont déjà été évalués voire employés dans les centrales thermiques A-USC²¹³ : il s’agit de l’Inconel 740H, du Haynes 282 et de l’alliage 263. Comparer les alliages optimisés aux alliages 740H et 282 est particulièrement pertinent, ceux-ci représentant la dernière génération de super-alliages renforcés par précipitation mais facilement mis en œuvre, conçus spécifiquement pour les turbines et chaudières du secteur énergétique.

Par souci de clarté, seuls deux alliages sont sélectionnés comme potentielles alternatives aux alliages commerciaux sus-mentionnés. Dans un premier temps, la sélection est opérée sans méthode d’aide à la décision multicritères et seulement à partir de comparaisons directes et simples, dans le but d’illustrer la capacité de l’algorithme d’optimisation à trouver des alliages aux propriétés améliorées. Par la suite, l’aide à la décision multicritères sera utilisée et ses résultats seront comparés à la sélection manuelle.

Comparés aux alliages commerciaux, les deux alliages sélectionnés manuellement devraient posséder des propriétés thermomécaniques supérieures (R_e , R_m , CRF), une stabilité et un désaccord paramétrique au moins équivalents, un prix plus faible et un BTR réduit. Ces alliages devraient évidemment être renforcés par précipitation et protégés en surface par une couche de sesquioxyde de chrome.

Ces alliages ont été choisis sur la base de comparaisons directes de leurs propriétés thermomécaniques, de leur désaccord paramétrique, de leur BTR et de leur coût par rapport aux alliages commerciaux. Les prédictions de R_e , R_m et CRF prenant la forme d’une gaussienne, la sélection

peut être traduite en termes probabilistes : en considérant les propriétés des alliages commerciaux comme une distribution gaussienne de variance nulle, il est possible de quantifier l'aire partagée avec la distribution gaussienne des propriétés des alliages optimisés, définies par une moyenne et un écart-type fournis par les processus gaussiens. Le pourcentage résultant indique la probabilité qu'un alliage optimal possède des propriétés supérieures aux alliages commerciaux (figure 3.39).

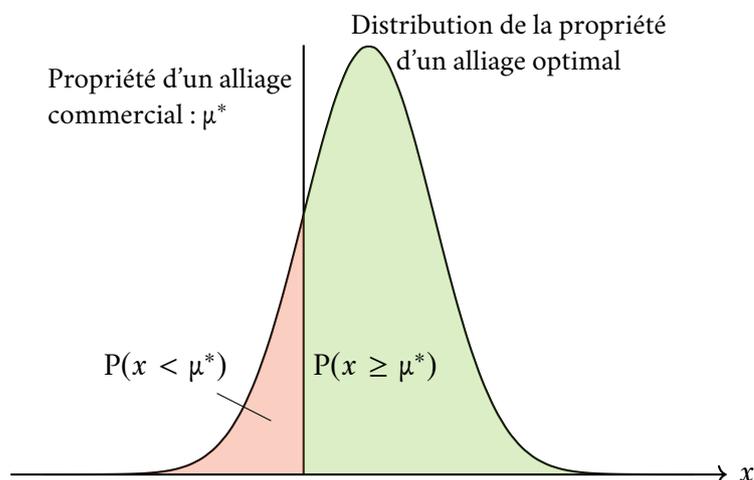


Figure 3.39 — Illustration du principe de comparaison des alliages optimisés avec les alliages commerciaux existants. La gaussienne représente la distribution de la propriété d'un alliage optimal; la barre verticale correspond à la propriété d'un alliage commercial. La zone verte symbolise la probabilité que la propriété de l'alliage optimal soit supérieure à celle de l'alliage commercial; la zone rouge symbolise l'inverse.

3.8.5.1 Alternative à l'Inconel 740H et au Haynes 282

L'Inconel 740H (tableau 3.18) est un superalliage Ni-Cr-Co renforcé par précipitation spécifiquement conçu pour les chaudières de centrales thermiques. Il possède une bonne stabilité en température conférée par son faible volume de γ' et sa constitution dénuée de phases TCP à 750 °C (tableau 3.19). Cependant, les additions significatives de niobium et de carbone permettent la formation de carbures NbC²¹⁴ diminuant sa soudabilité déjà contrecarrée par un BTR important. L'alliage est également relativement onéreux à cause de la forte teneur en cobalt et de l'addition limitée de fer.

Le Haynes 282 (tableau 3.18) est un superalliage Ni-Cr-Co-Mo renforcé par précipitation caractérisé selon le fabricant par une bonne fabricabilité et une bonne résistance au fluage, ce qui en fait un matériau de choix pour les turbines des secteurs aéronautique et énergétique. La présence limitée de phase durcissante γ' garantit sa soudabilité et sa stabilité en température, bien que cette dernière soit discutable : en effet, des précipités de phase σ ont été observés dans des échantillons moulés²¹⁵; le calcul de l'équilibre thermodynamique dont les résultats sont présentés dans le tableau 3.19 prédit en outre la présence de cette phase à 750 °C — ainsi que de la phase μ . Comparé à l'Inconel 740H, la diminution du prix due à une teneur en cobalt plus faible est contrebalancée par une teneur accrue en molybdène.

L'alternative issue de l'optimisation et ici sélectionnée, l'alliage ALT 740H (tableau 3.18), a un prix légèrement inférieur à celui des alliages 740H et 282 mais des propriétés mécaniques potentiellement améliorées (tableau 3.20). Sa constitution stable est proche de celle de l'Inconel 740H (tableau 3.19). Néanmoins sa soudabilité devrait être meilleure : en effet, les contraintes d'optimisation limitent le pourcentage de niobium, empêchant la formation de carbures NbC délétères; de

TABLEAU 3.18 — Composition nominale (%_{mass.}), coût (normalisé par rapport au prix du nickel), désaccord paramétrique (calculé à 750 °C) et BTR de l’Inconel 740H, du Haynes 282 et de l’alternative sélectionnée, l’alliage ALT 740H.

Alloy	Ni	Co	Fe	Cr	Mo	W	Nb	Al	Ti	C	Coût (%/Ni)	δ (‰)	BTR (K)
Inconel 740H	~50	20,0	1,0	24,5	0,1	—	1,5	1,35	1,35	0,04	132	15	180
Haynes 282	~57	10,0	~1	20	8,5	—	—	1,5	2,1	0,06	126	-4	94
ALT 740H	~49	18,9	6,2	19,0	0,1	2,5	—	2,6	1,9	0,09	124	7	93

surcroît, son BTR est divisé de moitié. La formation d’une quantité plus importante de carbures pourrait cependant affecter négativement la soudabilité. L’alliage ALT 740H possède une proportion plus importante de phase γ' (tableau 3.19) dont la formation est assurée par une teneur en aluminium doublée. Conjugée à l’addition de tungstène et de carbone, cette proportion pourrait contrebalancer la perte de résistance causée par la diminution de la concentration en niobium. La forte teneur en fer de l’alliage ALT 740H contribue à l’abaissement de son prix. Enfin, son désaccord paramétrique plus faible indique que les changements morphologiques de la phase γ' au cours du temps devraient être moins prononcés que dans l’Inconel 740H.

TABLEAU 3.19 — Constitution à l’équilibre à 750 °C (en %_{mol.}) de l’Inconel 740H, du Haynes 282 et de l’alliage ALT 740H telle que calculée avec Thermo-Calc et TTNI8.

Alliage	γ	γ'	$M_{23}C_6$	NbC	TCP
Inconel 740H	81,6	17,8	0,6	0,1	—
Haynes 282	72,7	19,6	1,4	—	3,0 σ ; 3,2 μ
ALT 740H	72,9	24,9	2,1	—	—

Le tableau 3.20 montre que l’alliage ALT 740H pourrait posséder une résistance à la traction et une limite d’élasticité supérieures d’environ 120 MPa à 750 °C comparées à l’Inconel 740H ; la contrainte de rupture par fluage pour 1000 h à 750 °C progresserait d’environ 50 MPa. Ces gains de propriétés sont illustrés sur les figures 3.40 et 3.41 sur lesquelles l’évolution prédite des propriétés nominales (non-réduites d’un écart-type) sont tracées sur une plage de température de 300 °C centrée sur la température de service prévue. Les propriétés des alliages commerciaux sur ces figures ont également été prédites par les processus gaussiens : leurs valeurs à 750 °C diffèrent donc légèrement de celles du tableau 3.20 mais les tendances demeurent identiques. À noter que les bases de données des processus gaussiens incluent des données sur les alliages 740H et 282 — les erreurs prédictives sont donc minimales. Les probabilités que l’alliage ALT 740H possède des propriétés mécaniques supérieures à celles de l’Inconel 740H sont supérieures à 69 % (tableau 3.20).

L’alliage ALT 740H a un prix et un BTR similaires au Haynes 282. La suppression du molybdène constitue le changement le plus significatif comparé à ce dernier, et devrait être bénéfique à la constitution de l’alliage ALT 740H. En effet, ceci devrait limiter la formation de phases TCP et donc améliorer la stabilité en température. La résistance de l’alliage ALT 740H est garantie par une proportion plus importante de γ' (tableau 3.19) et des additions notables de tungstène et de carbone. L’effet sur le prix de la teneur doublée en cobalt est contrebalancé par l’élimination du molybdène et la teneur en fer six fois plus importante. Les probabilités que l’alliage ALT 740H ait des propriétés thermomécaniques supérieures au Haynes 282 dépassent 66 %, les gains à 750 °C allant d’environ 40 MPa pour R_m et CRF en 10⁵ h, à 150 MPa pour R_e (tableau 3.20, figures 3.40 et 3.41).

TABLEAU 3.20 — Propriétés nominales prédites de l’alliage ALT 740H (écart-type entre parenthèses) et propriétés moyennes de l’Inconel 740H et du Haynes 282 à 750 °C telles que rapportées par Specials Metals et Haynes Intl. respectivement. CRF est donnée pour un temps de 1000 h. Les pourcentages représentent les probabilités que l’alliage ALT 740H possède des propriétés supérieures à celles des deux alliages commerciaux; elles sont calculées à partir de la distribution gaussienne des prédictions.

Alliage	R _m (MPa)	R _e (MPa)	CRF (MPa)
ALT 740H	915 ± 170	785 ± 130	345 ± 110
Inconel 740H	790	660	290
	77 %	83 %	69 %
Haynes 282	870	630	280
	60 %	88 %	72 %

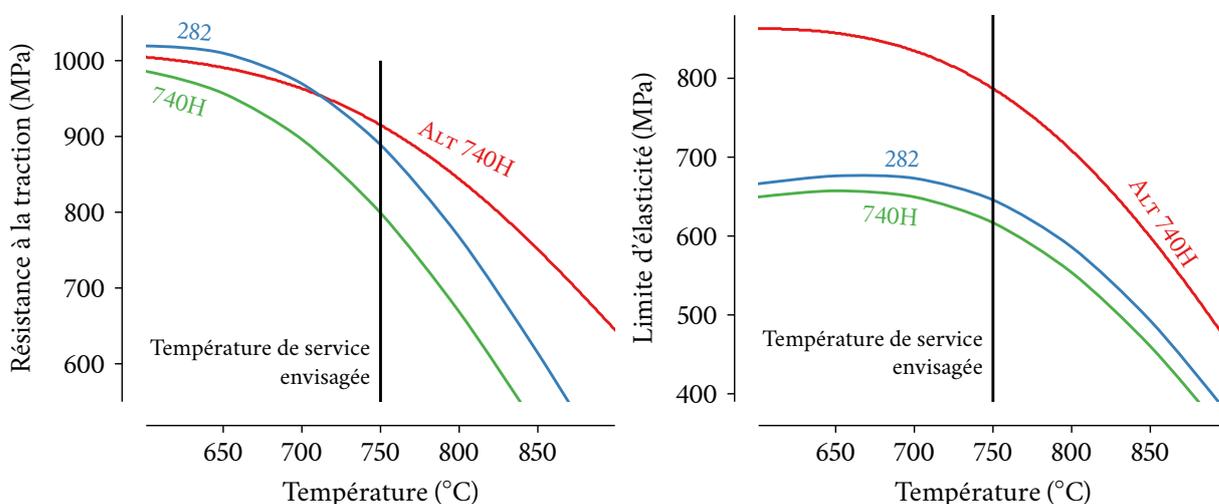


Figure 3.40 — Évolution prédite de la résistance à la traction (à gauche) et de la limite d'élasticité (à droite) de l’Inconel 740H, du Haynes 282 et de l’alliage optimisé ALT 740H en fonction de la température. La ligne verticale représente la température de service prévue de 750 °C.

3.8.5.2 Alternative à l’alliage 263

L’alliage 263 (tableau 3.21) est un superalliage Ni-Cr-Co-Mo également renforcé par précipitation, dont l’utilisation dans les centrales thermiques est également considérée. Comparé aux alliages 740H et 282, il ne contient qu’une quantité limitée d’éléments formeurs de γ' . Cependant, sa composition riche en titane et pauvre en aluminium le rend susceptible à la formation de plaquettes de phase η aux joints de grains²¹⁶ dont l’alternative proposée, l’alliage ALT 263 (tableau 3.21) évite l’apparition en limitant les additions de titane (tableau 3.22).

TABLEAU 3.21 — Composition nominale (%_{mass.}), coût (normalisé par rapport au prix du nickel), désaccord paramétrique (calculé à 750 °C) et BTR de l’alliage 263 et de l’alternative sélectionnée, l’alliage ALT 263.

Alliage	Ni	Co	Fe	Cr	Mo	W	Nb	Al	Ti	C	Coût (%/Ni)	δ (‰)	BTR (K)
alliage 263	~50	20,0	0,4	20	5,9	—	—	0,4	2,2	0,06	140	4	113
ALT 263	~45	20,1	10,5	19,3	0,2	0,1	—	3,6	1,3	0,12	120	4	46

Le coût de l’alliage ALT 263 est 15 % inférieur à celui de l’alliage 263 du fait de l’addition du fer et de

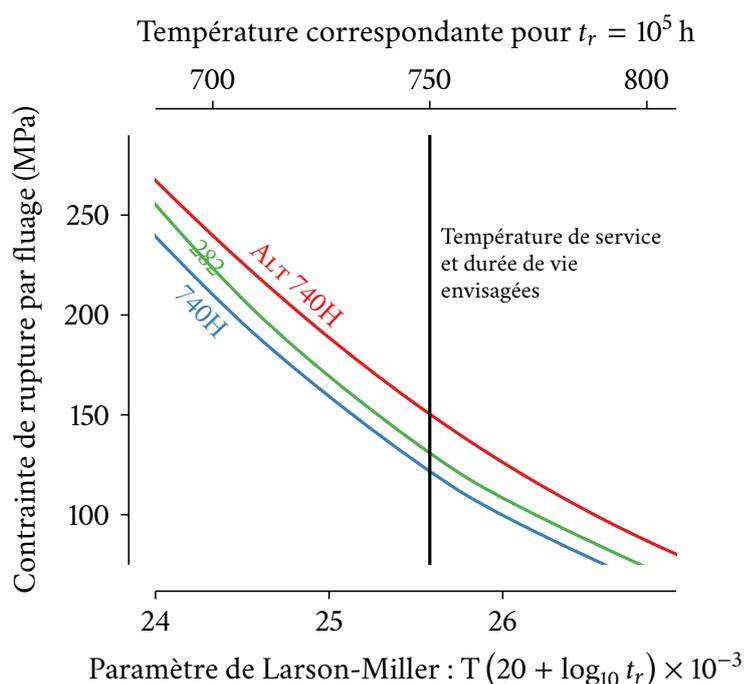


Figure 3.41 — Évolution prédite de la CRF avec le paramètre de Larson-Miller (avec t_r le temps avant rupture en heures et T la température absolue en Kelvins) de l’Inconel 740H, du Haynes 282 et de l’alliage optimisé ALT 740H. La ligne verticale représente le temps et la température de service prévus : 10^5 h à 750 °C.

TABLEAU 3.22 — Constitution à l’équilibre à 750 °C (en %_{mol.}) de l’alliage 263 et de l’alliage ALT 263 telle que calculée avec Thermo-Calc et TTNI8.

Alliage	γ	γ'	$M_{23}C_6$	η	TCP
alliage 263	88,8	—	1,4	9,5	0,3 μ
ALT 263	73,1	24,2	2,7	—	—

la suppression du molybdène. Néanmoins, les probabilités que l’alliage optimisé présente des propriétés améliorées par rapport à l’alliage 263 sont au-dessus de 80 % (tableau 3.23). Ces propriétés sont notamment assurées par la fraction molaire de phase γ' de 24,2 %_{mol.} à 750 °C et la teneur en carbone doublée; en conséquence, la fraction molaire de carbures riches en chrome dans l’alliage alternatif est deux fois celle de l’alliage 263 (tableau 3.22). Cette proportion plus importante de carbures pourrait négativement affecter la soudabilité de l’alliage ALT 263; néanmoins, ce dernier possède un BTR deux fois moins important que celui de l’alliage 263.

TABLEAU 3.23 — Propriétés nominales prédites de l’alliage ALT 263 (écart-type entre parenthèses) et propriétés moyennes de l’alliage 263 à 750 °C telles que rapportées par Specials Metals. CRF est donnée pour un temps de 1000 h. Les pourcentages représentent les probabilités que l’alliage ALT 263 possède des propriétés supérieures à celles de l’alliage 263; elles sont calculées à partir de la distribution gaussienne des prédictions.

Alliage	R_m (MPa)	R_e (MPa)	CRF (MPa)
ALT 263	880 ± 200	770 ± 190	440 ± 195
alliage 263	700	500	190
	82 %	92 %	90 %

L'évolution comparative des propriétés nominales prédites est illustrée sur la figure 3.42. À 750 °C, des améliorations de plus de 150 MPa pour R_m et de 250 MPa pour R_e sont attendues, tandis que la CRF en 10^5 h pourrait être bonifiée de 130 MPa.

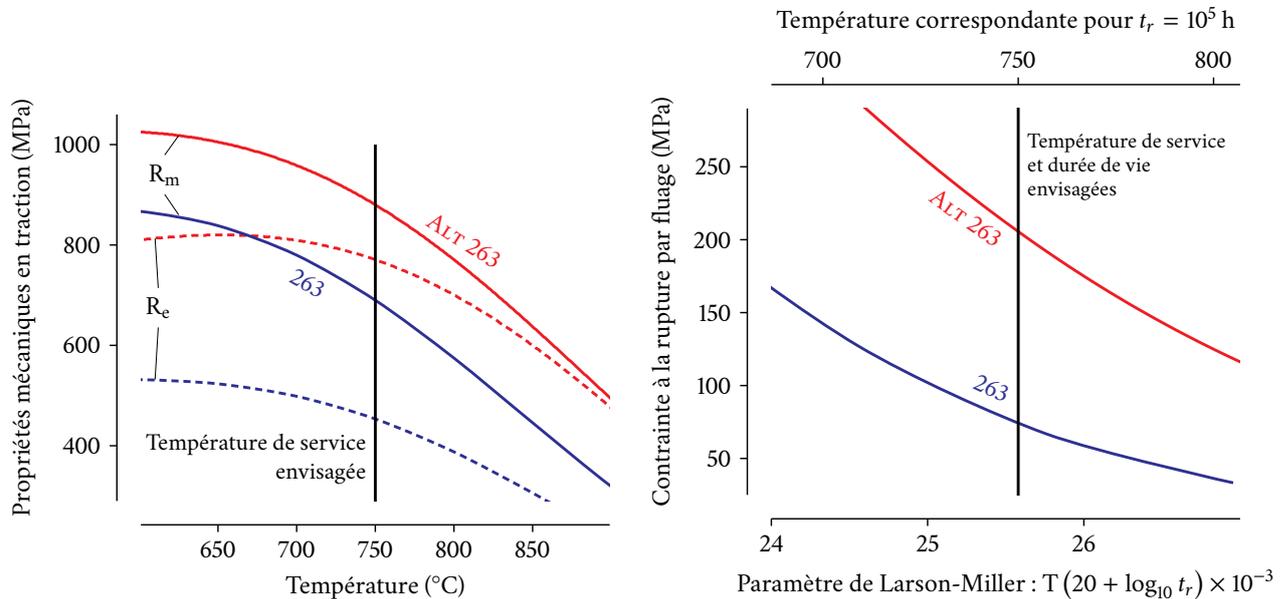


Figure 3.42 — À gauche : évolution prédite de la résistance à la traction et de la limite d'élasticité de l'alliage 263 et de l'alliage optimisé ALT 263 en fonction de la température. La ligne verticale représente la température de service prévue de 750 °C. À droite : évolution prédite de la CRF avec le paramètre de Larson-Miller (avec t_r , le temps avant rupture en heures et T la température absolue en Kelvins) de l'alliage 263 et de l'alliage optimisé ALT 263. La ligne verticale représente le temps et la température de service prévus : 10^5 h à 750 °C.

Enfin, il est à noter que l'alliage ALT 263 constitue l'alternative la plus onéreuse parmi les alliages optimisés étant thermomécaniquement compétitifs par rapport à l'alliage 263, malgré le fait qu'il soit déjà 15 % moins cher. Des alliages optimisés aux propriétés similaires à l'alliage 263 ont été trouvés pour seulement 59 % de son prix.

3.9 Sélection à l'aide de l'analyse décisionnelle multicritères

La sélection d'un alliage dans l'espace des objectifs à six dimensions parmi les milliers d'alliages issus de l'optimisation est une tâche complexe pour le cerveau humain. Comme décrit précédemment, cette tâche peut s'appuyer sur des approches probabilistes et/ou sur des comparaisons binaires de chaque propriété, mais elle peut également bénéficier des méthodes d'aide à la décision multicritères telles que PROMETHEE. Cette dernière est utilisée dans cette section pour déterminer la meilleure alternative selon deux cahiers des charges hypothétiques. Les résultats seront comparés à ceux de la sélection manuelle précédemment opérée, ainsi qu'à l'Inconel 740H.

Sur les 5669 alliages Pareto-optimaux obtenus précédemment, seuls 4602 sont retenus dans le cadre de la sélection par PROMETHEE. Les individus dont la valeur moyenne prédite de la limite d'élasticité dépasse celle de la résistance à la traction ont en effet été retirés. De telles prédictions ne sont *a priori* pas aberrantes. D'une part, elles sont issues de modèles de fouille de données indépendants : le modèle de R_m ne « sait » donc pas qu'il « devrait » trouver pour chaque alliage une valeur plus élevée que son homologue décrivant R_e . D'autre part, elles revêtent par nature un caractère probabiliste où la valeur moyenne est entachée d'une erreur prédictive : une valeur moyenne prédite de la limite d'élasticité supérieure à celle de la résistance à la traction n'est pas incompatible avec une valeur réelle de R_e inférieure à R_m . Cet écart peut également être symptomatique d'une extrapolation excessive de la prédiction comparée aux données des bases. Malgré tout, une telle configuration serait susceptible de causer un biais lors des calculs de préférences et il a été jugé préférable de l'éviter. Par cohérence, les sélections suivantes sont opérées notamment sur les critères d'optimisation, c'est-à-dire sur les propriétés réduites $R_m^{-1\sigma}$, $R_e^{-1\sigma}$ et $CRF^{-1\sigma}$.

3.9.1 Choix d'une alternative globale

Dans le cas où le preneur de décision est indécis quant à l'importance à accorder à chaque caractéristique des alliages, il est possible de choisir une pondération uniforme : à chacune des n caractéristiques est associé un poids $1/n$. D'une certaine manière, cette pondération permet de déterminer la « meilleure alternative globale » qui accommode le mieux tous les critères.

Cette approche conduit au diamant PROMETHEE représenté sur la [figure 3.43](#). Le flux positif ϕ^+ de toutes les alternatives (axe de droite) est représenté en fonction de leur flux négatif ϕ^- (axe de gauche). La somme de ces deux flux donne le flux net ϕ , variant entre -1 et 1 et symbolisé par l'axe vertical au centre de la figure. Les alternatives sont situées à gauche du diamant puisque, par définition, la somme de leurs coordonnées est inférieure à 1. Les croix rouges ou bleue sont les 29 alternatives incomparables dont les flux sont Pareto-optimaux : parmi eux, il n'est pas possible d'obtenir un flux positif plus grand sans augmenter le flux négatif. Cette représentation illustre un des avantages de PROMETHEE, qui permet de réduire le nombre d'alternatives à considérer lors de la sélection en rapportant le problème initialement à six objectifs à une sélection bicritères.

L'alliage $ALT_{PROM GEN}$ (croix bleue sur la [figure 3.43](#)) est sélectionné en tant qu'alternative possédant le flux net le plus élevé. Comparé à l'Inconel 740H, sa composition est chargée en aluminium et en chrome, ce qui devrait aider à compenser l'absence de niobium ([tableau 3.24](#)). La teneur en cobalt diminuée de moitié et celle en fer décuplée permettent de réduire de 18 % le coût de l'alliage $ALT_{PROM GEN}$ par rapport à son concurrent. Néanmoins, ses propriétés nominales demeurent supérieures à celle de l'Inconel ([figures 3.44](#) et [3.45](#)).

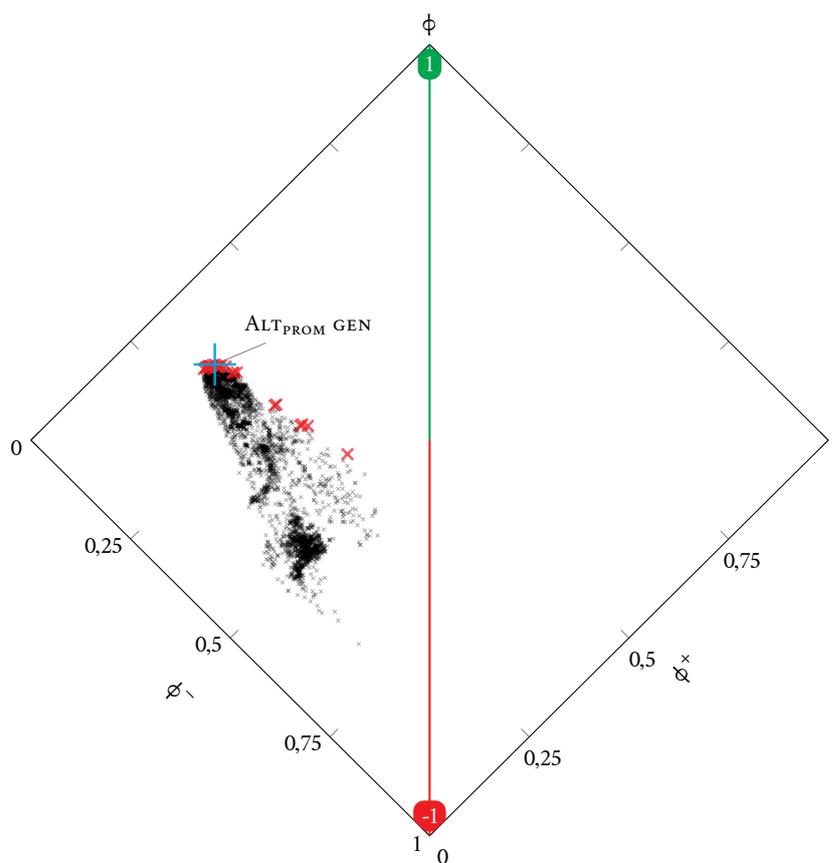


Figure 3.43 — Représentation « diamant PROMETHEE » de toutes les alternatives selon une pondération uniforme de leurs propriétés.

L'alliage $ALT_{PROM\ GEN}$ est caractérisé par un désaccord paramétrique 70 % plus faible que celui de l'Inconel 740H, ce qui devrait lui conférer une meilleure stabilité en température et une résistance au fluage accrue. Son BTR réduit de 75 % devrait en outre garantir une meilleure soudabilité.

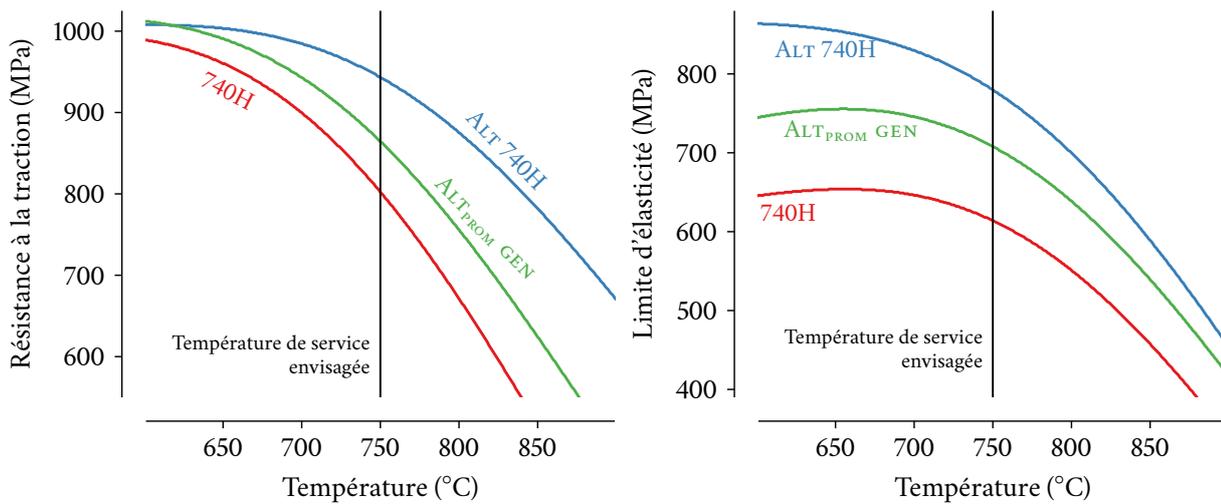


Figure 3.44 — Évolution prédite de la résistance à la traction (à gauche) et de la limite d'élasticité (à droite) de l'alliage ALT 740H sélectionné manuellement, de l'Inconel 740H et de l'alliage ALT_{PROM GEN} en fonction de la température. La ligne verticale représente la température de service prévue de 750 °C.

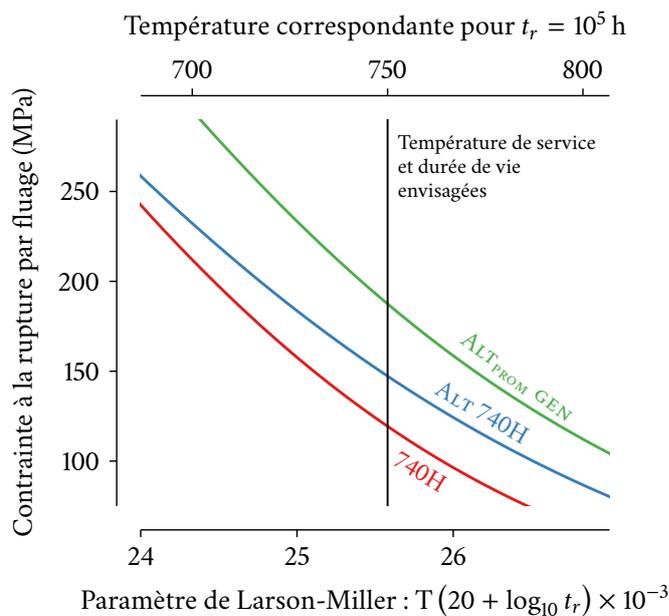


Figure 3.45 — Évolution prédite de la CRF en fonction du paramètre de Larson-Miller (avec t_r le temps avant rupture en heures et T la température absolue en Kelvins) de l'alliage ALT 740H sélectionné manuellement, de l'alliage 740H et de l'alliage ALT_{PROM GEN}. La ligne verticale représente le temps et la température de service prévus : 10^5 h à 750 °C.

Les propriétés mécaniques en traction de l'alliage ALT 740H sont supérieures à celles de l'alliage ALT_{PROM GEN} (figure 3.44); cependant cette supériorité est acquise au détriment du coût, de la résistance au fluage et de la soudabilité. La principale différence entre les deux alliages réside dans l'absence de tungstène dans l'alliage ALT_{PROM GEN}, dont le renforcement repose donc en grande partie sur la précipitation.

L'alliage ALT_{PROM GEN} apparaît ainsi non seulement comme un excellent compromis global par rapport à tous les alliages de l'ensemble de Pareto, mais également comme une alternative potentielle à l'Inconel 740H.

TABLEAU 3.24 — Composition et caractéristiques de l’Inconel 740H et des alliages ALT 740H, ALT_{PROM GEN} et ALT_{PROM CRF}. Les valeurs entre parenthèses sont les prédictions nominales et sont juxtaposées aux prédictions « réduites ». L’alliage ALT 740H a été sélectionné manuellement dans la sous-section précédente; l’alliage ALT_{PROM GEN} représente une sorte de compromis global de l’ensemble de Pareto; l’alliage ALT_{PROM CRF} est sélectionné dans la sous-section suivante suivant une pondération priorisant la résistance au fluage. Les poids servant lors des calculs des préférences sont soulignés.

	Alliage	740H	ALT 740H	ALT _{PROM GEN}	ALT _{PROM CRF}		
% _{mass.}	Ni	~50	~49	~50	~47		
	Co	20	18,9	13,6	17,1		
	Fe	1,0	6,2	11,8	10,8		
	Cr	24,5	19,0	19,3	19,3		
	Mo	0,1	0,1	0,2	0,2		
	W	—	2,5	0,1	0,5		
	Nb	1,5	—	—	—		
	Al	1,35	2,6	3,7	3,6		
	Ti	1,35	1,9	1,3	1,3		
	C	0,04	0,09	0,12	0,13		
Coût (%/Ni)	130	123	106	<u>1</u>	114	<u>2</u>	
MPa	R _m	790	745 (915)	661 (864)	<u>1</u>	667 (872)	<u>1</u>
	R _e	660	655 (785)	516 (708)	<u>1</u>	558 (749)	<u>1</u>
	CRF	290	235 (345)	228 (412)	<u>1</u>	246 (449)	<u>5</u>
% _{oo}	δ	15,0	7,2	4,1	<u>1</u>	4,4	<u>3</u>
K	BTR	180	93	45	<u>1</u>	46	<u>2</u>

3.9.2 Choix d’une alternative orientée vers la résistance au fluage

Si l’utilisateur final désire un compromis favorisant certains objectifs, la pondération de PROMETHEE peut être adaptée. Par exemple, pour fabriquer des tuyauteries de centrales électriques, l’utilisateur pourrait privilégier la résistance au fluage, propriété pertinente dans ce type d’application « statique » par rapport aux propriétés en traction qui seraient intéressantes pour des pièces en mouvement subissant de la fatigue. Par ailleurs, les tuyauteries sont systématiquement soudées, ce qui impose une bonne soudabilité. Finalement, ces objets de très grandes dimensions requièrent le recours à des matériaux au coût modéré. L’utilisateur pourrait alors désirer, dans l’ordre d’importance, un alliage résistant au fluage, facilement soudable et peu onéreux, les propriétés en traction étant moins critiques; il pourrait donc affecter les poids suivants aux caractéristiques optimisées :

- 5 à la contrainte de rupture par fluage;
- 3 au désaccord paramétrique, influant également sur la résistance au fluage;
- 2 au BTR et au coût;
- 1 aux deux propriétés thermomécaniques en traction.

Les propriétés thermomécaniques en traction ne sont pas ignorées et demeurent prises en compte marginalement dans le calcul des préférences. La pondération conduit aux résultats représentés sur la figure 3.46. L’alliage au flux net le plus élevé est l’alliage ALT_{PROM CRF}.

Comparé à l’alliage ALT_{PROM GEN}, le ALT_{PROM CRF} possède bien une meilleure résistance au fluage mais également un désaccord paramétrique et un BTR plus grands, ainsi que des propriétés en traction plus élevées. Ce constat, en apparence contradictoire avec les préférences émises par

l'utilisateur, se trouve justifié par la valeur des seuils d'indifférence et de préférence stricte ([tableau 3.25](#)). En effet, la différence de δ et de BTR entre les deux alliages tombe dans la zone d'indifférence; l'augmentation de ces caractéristiques ne pénalise donc pas l'alliage $ALT_{\text{PROM CRF}}$. De la même manière, l'augmentation des propriétés mécaniques en traction ne bénéficie pas à cet alliage, dans la mesure où cette croissance est contenue dans la zone d'indifférence pour R_m ou proche de cette zone pour R_e . Enfin, la différence de prix est dans la zone de préférence croissante, plus proche du seuil d'indifférence que du seuil de préférence stricte. La préférence accordée à l'alliage $ALT_{\text{PROM GEN}}$ par rapport à l'alliage $ALT_{\text{PROM CRF}}$ sur ce dernier critère est donc relativement faible et se trouve contrebalancée dans les flux totaux par les préférences calculées sur les autres critères. Cet aspect sera discuté ultérieurement.

TABLEAU 3.25 — Seuils d'indifférence et de préférence stricte servant au calcul des préférences.

Critère	Coût (%)	R_m (MPa)	R_e (MPa)	CRF (MPa)	δ (‰)	BTR (K)
Seuil d'indifférence r	3	33	35	13	0,8	9
Seuil de préférence stricte s	20	200	207	81	4,6	52

La composition de l'alliage $ALT_{\text{PROM CRF}}$ ([tableau 3.24](#)) est proche de celle de l'alliage $ALT_{\text{PROM GEN}}$, à l'exception du nickel et du fer, substitués en partie par du cobalt, et de l'addition accrue de tungstène. La proportion de phase γ' est identique malgré un ratio Al/Ti légèrement plus faible ([tableau 3.26](#)).

TABLEAU 3.26 — Constitution à l'équilibre à 750 °C (en %_{mol.}) de l'Inconel 740H et des alliages sélectionnés telle que calculée avec Thermo-Calc et TTNI8.

Alliage	γ	γ'	$M_{23}C_6$	NbC	TCP
740H	81,6	17,8	0,6	0,1	—
ALT 740H	72,9	24,9	2,1		
$ALT_{\text{PROM GEN}}$	72,3	25,0	2,7		—
$ALT_{\text{PROM CRF}}$	72,2	24,9	3,0		

Les propriétés en traction de l'alliage $ALT_{\text{PROM CRF}}$ sont supérieures à celles de l'Inconel 740H ([figure 3.47](#)). L'alliage $ALT_{\text{PROM CRF}}$ surpasse les autres alliages, y compris l'alliage $ALT_{\text{PROM GEN}}$, en matière de résistance au fluage ([tableau 3.24](#) et [figure 3.48](#)). Remarquablement, ces performances sont atteintes pour un prix 12 % plus faible que celui de l'Inconel 740H.

Si le rang des alternatives produit par PROMETHEE II avec les deux jeux de poids est recalculé après avoir ajouté l'Inconel 740H à la liste des alternatives, ce dernier, ainsi que l'alliage ALT 740H sélectionné manuellement, sont relégués en bas du classement ([tableau 3.27](#)). En outre, ceci démontre aussi la performance de la méthode d'optimisation : en effet, la plupart des alliages Pareto-optimaux surpasse l'Inconel 740H, qui représente « l'état de l'art » des alliages pour centrales thermiques.

L'alliage ALT 740H est compétitif vis-à-vis de l'Inconel mais ne constitue pas l'alternative préférée selon la classification. Cette différence entre la sélection manuelle et PROMETHEE met en évidence à la fois la faible « efficacité » des décisions humaines dans des espaces multidimensionnels contenant une grande quantité de compromis, et la capacité de PROMETHEE de compléter l'avis du preneur de décision en mettant en avant les choix les plus pertinents selon les désirs de ce dernier. Ces désirs sont ici traduits à des fins d'illustration; en pratique, l'utilisateur devrait être en mesure

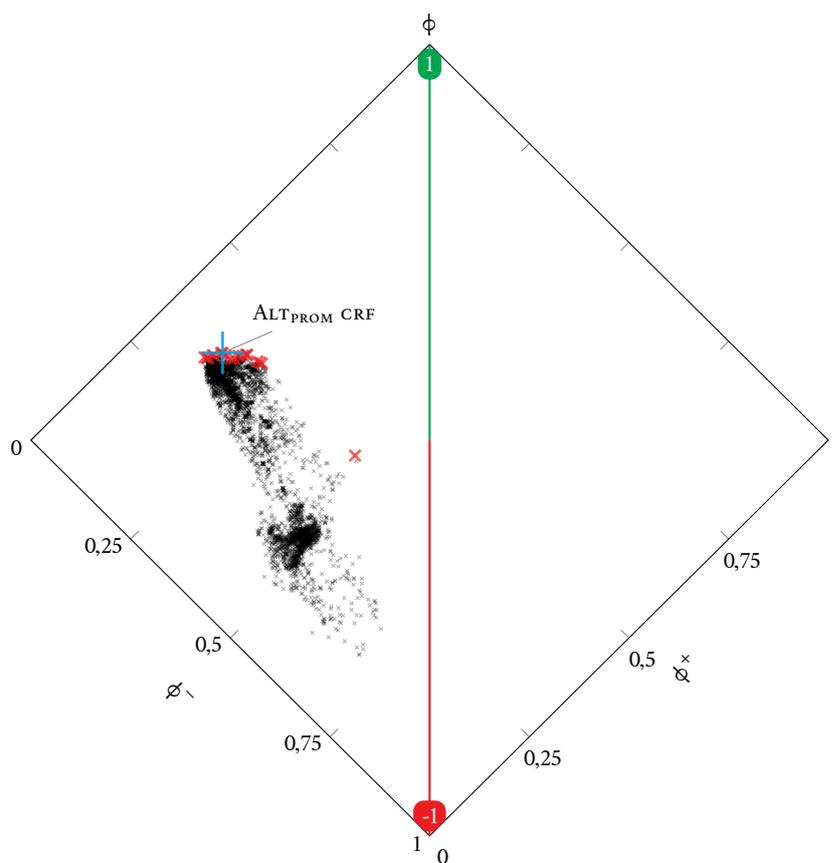


Figure 3.46 — Représentation « diamant PROMETHEE » de toutes les alternatives selon une pondération mettant l'accent sur la contrainte de rupture par fluage.

TABLEAU 3.27 — Classement des alliages ALT 740H, ALT_{PROM GEN} et ALT_{PROM CRF} ainsi que de l'Inconel 740H dans les deux cas de sélection.

Poids	Alliage	Rang, sur 4602
1-1-1-1-1-1	ALT _{PROM GEN}	1
	ALT _{PROM CRF}	3
	ALT 740H	2561
	740H	3324
2-1-1-5-3-2	ALT _{PROM CRF}	1
	ALT _{PROM GEN}	9
	ALT 740H	2823
	740H	3002

de placer les seuils d'indifférence et de préférence stricte de façon plus réaliste, ces seuils pouvant avoir, comme illustré précédemment, une influence notable sur les alternatives proposées.

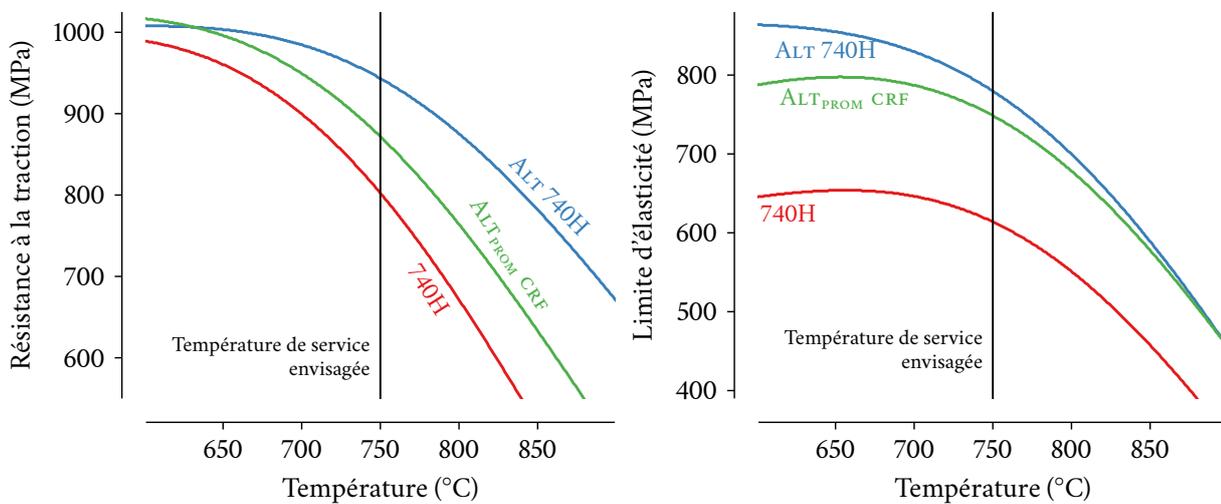


Figure 3.47 — Évolution prédite de la résistance à la traction (à gauche) et de la limite d'élasticité (à droite) de l'alliage ALT 740H sélectionné manuellement, de l'Inconel 740H et de l'alliage ALT_{PROM} CRF en fonction de la température. La ligne verticale représente la température de service prévue de 750 °C.

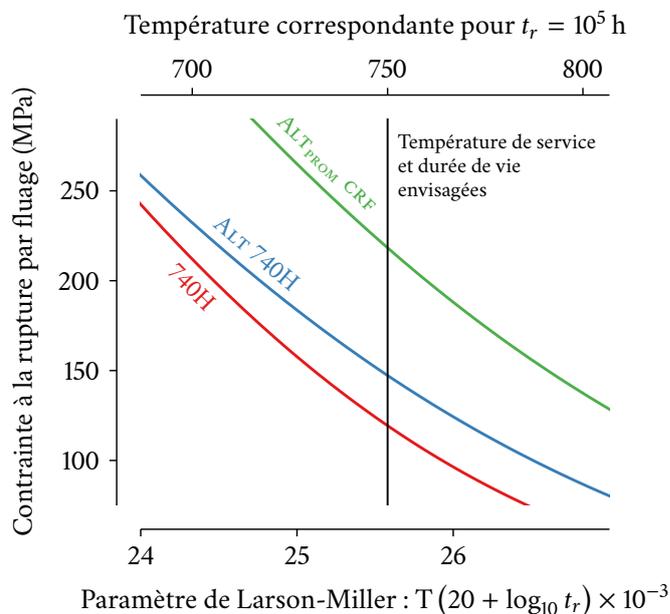


Figure 3.48 — Évolution prédite de la CRF en fonction du paramètre de Larson-Miller (avec t_r le temps avant rupture en heures et T la température absolue en Kelvins) de l'alliage ALT 740H sélectionné manuellement, de l'alliage 740H et de l'alliage ALT_{PROM} CRF. La ligne verticale représente le temps et la température de service prévus : 10⁵ h à 750 °C.

3.10 Analyse de la sensibilité des compositions optimales proposées

Les optimisations ayant amené à la sélection de quelques alliages optimaux ont été conduites avec une précision de 0,1 %_{mass.} afin de permettre une exploration « fine » de l'espace de recherche. Cependant, cette précision peut ne pas être représentative de la précision inhérente à l'élaboration à l'échelle industrielle des alliages : une « erreur » de l'ordre de 0,5 %_{mass.} semble plus réaliste (voir, par exemple, le [tableau 3.15](#)). Il apparaît donc pertinent de calculer les effets de la déviation des teneurs en éléments d'alliage par rapport à la composition nominale, notamment sur la constitution et les propriétés thermomécaniques des alliages candidats.

En pratique, il est superflu d'estimer la sensibilité des compositions vis-à-vis des propriétés thermomécaniques. En effet, celles-ci sont issues d'une modélisation par processus gaussiens reposant sur une base de données dont le contenu, extrait notamment de la littérature technique, est déjà empreint d'une variabilité représentative des variations industrielles de composition. Cette variabilité est exprimée par l'intermédiaire de l'incertitude de prédiction qui renseigne ainsi non seulement sur la confiance du modèle mais également sur la sensibilité de la composition.

Ainsi, l'analyse de la sensibilité des compositions optimales est ici conduite uniquement vis-à-vis de la constitution des alliages, dans le cadre du dernier cas d'optimisation concernant les superalliages pour centrales thermiques. Il s'agit de vérifier l'ampleur maximale des variations autorisée de chaque élément avant que la contrainte de constitution à 750 °C, c'est-à-dire à la température de service envisagée, ne soit plus respectée. Pour rappel, cette contrainte à 750 °C est doublée d'une autre à 700 °C, qui représente la température inférieure de la « fenêtre de stabilité » devant être respectée. Cette seconde contrainte est plus sévère que celle à 750 °C car il est plus fréquent que des phases indésirables apparaissent à plus basse température. Sa vérification permet ainsi d'assurer la robustesse de l'optimisation d'un point de vue thermodynamique, notamment en confirmant les résultats du calcul de l'équilibre à 750 °C. Cette contrainte plus sévère permet également de se prémunir d'éventuelles variations de compositions néfastes ; autrement dit, le respect de cette contrainte garantit généralement une plage de compositions plus large dans laquelle la contrainte à 750 °C est respectée. Néanmoins, la vérification de cette robustesse par l'intermédiaire d'un calcul systématique à la température de service paraît prudente.

Afin de vérifier l'influence de la composition sur la constitution à 750 °C, la teneur en chaque élément d'alliage est augmentée ou diminuée par pas de 0,1 %_{mass.} jusqu'à ce que la contrainte de constitution ne soit plus respectée, c'est-à-dire que l'alliage ne soit plus uniquement constitué des phases γ , γ' et $M_{23}C_6$. Les augmentations et diminutions ne concernent qu'un élément à la fois, la balance étant toujours assurée par le nickel.

Les résultats de ce calcul sur l'alliage ALT 740H sont représentés graphiquement sur la [figure 3.49](#) pour tous les éléments d'alliage à l'exception du carbone, pour lequel le calcul n'est pas fait car sa teneur est généralement mieux contrôlée. À chaque élément d'addition sont associées deux barres représentant les écarts maximaux autorisés par rapport à la teneur nominale : la barre bleue symbolise l'écart maximal positif et la barre rouge l'écart maximal négatif. Les valeurs soulignées indiquent que la teneur a été diminuée jusqu'à atteindre zéro sans que la contrainte ne soit violée.

La [figure 3.49](#) montre que les plages autorisées s'étendent sur plus de 1 %_{mass.}, sauf pour le molybdène avec 0,5 %_{mass.}, ce qui reste industriellement acceptable. Ceci garantit une certaine « robustesse » à l'alliage ALT 740H lors de sa fabrication. À noter le comportement du cobalt et du fer, largement substituables (toute concentration par ailleurs égale).

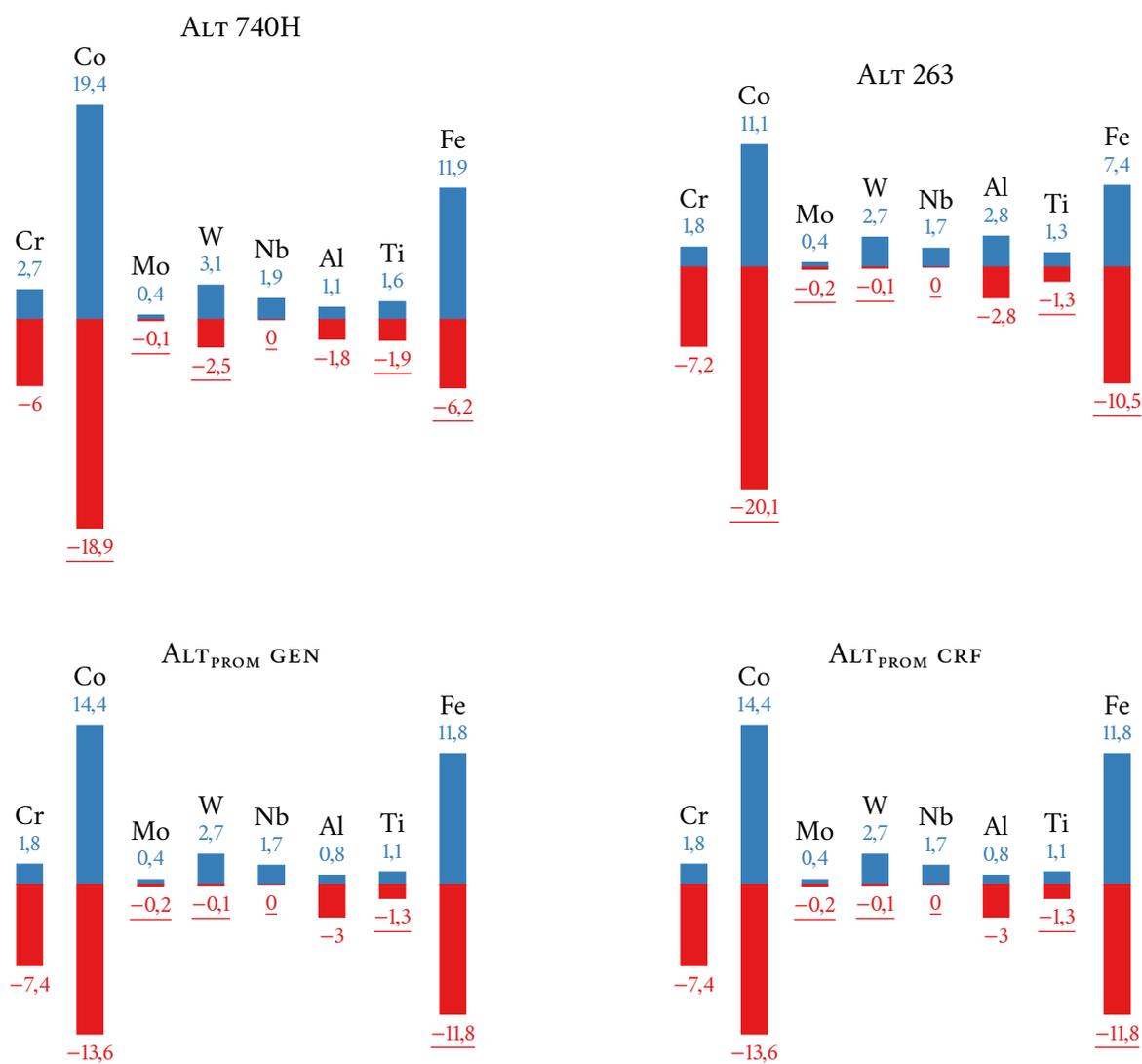


Figure 3.49 — Sensibilité (en %_{mass.}) de la composition des alliages optimaux ALT 740H, ALT 263, ALT_{PROM} GEN et ALT_{PROM} CRF. À chaque élément correspondent des écarts de teneur positif (barre bleue) et négatif (barre rouge) par rapport à la composition nominale. Les nombres soulignés signalent que la teneur de l'élément a atteint zéro sans que la contrainte de constitution n'ait été violée.

La figure 3.49 présente également les résultats de sensibilité des alliages ALT 263, ALT_{PROM} GEN et ALT_{PROM} CRF et confirme le comportement du cobalt. Les plages autorisées sont proches de celles du ALT 740H.

Ces observations laissent à penser que l'obtention de la constitution désirée n'est pas compromise par une variation d'ampleur faible d'un seul élément d'addition parmi huit. Cependant, le calcul de la sensibilité proposé ici est simpliste ; en particulier, il ne prend pas en compte les effets de la variation simultanée de plusieurs éléments. Il serait intéressant d'intégrer à la démarche d'optimisation cet aspect de « robustesse » de fabrication en sus de l'optimisation même de la composition.

3.11 Synthèse

La combinaison d'un algorithme génétique avec des outils prédictifs a permis l'optimisation multiobjectifs de la composition de superalliages à base de nickel. Les résultats consistent en un grand nombre de candidats potentiels pour des applications dans les secteurs de l'aéronautique ou de l'énergie. D'un point de vue métallurgique, ces alliages respectent les grandes lignes théoriques; cette adéquation entre composition, constitution et propriétés tend à confirmer la qualité des modèles de fouille de données (et des bases de données sous-jacentes) ainsi que l'aptitude de l'algorithme d'optimisation à les exploiter de concert avec la thermodynamique prédictive. D'un point de vue « ingénierie », la méthode proposée contraste par sa célérité avec l'approche essai-erreur ou les méthodes de conception s'appuyant sur des outils de calculs chronophages. L'automatisation de l'ajustement des compositions selon plusieurs critères antagonistes rapidement évalués raccourcit en effet les temps de développement d'un alliage de quelques mois (voire de quelques années) à quelques semaines voire quelques jours. En outre, la diversité des résultats (en matière de compositions) élargit les possibilités de sélection offertes à l'utilisateur final. Cette sélection, ardue pour l'esprit humain, peut être assistée par l'analyse décisionnelle multicritères qui conduit à des choix plus rigoureux formulés sur la base de préférences mathématiques. La performance prédite des alliages proposés, supérieure à celle de superalliages récemment mis sur le marché, illustre la marge d'optimisation existante et semble confirmer la pertinence de la méthode exploitée.

Références

2. SAUNDERS, N., CAHN, R. W., MCLEAN, M., RAPPAZ, M. & PETTIFOR, D. G. [Phase diagram calculations for high-temperature structural materials](#), *Philosophical Transactions: Physical Sciences and Engineering* **351** (1697), 543–561 (1995), cf. pages 4, 71.
15. TANCRET, F., BHADESHIA, H. K. D. H. & MACKAY, D. J. C. [Design of a creep resistant nickel base superalloy for power plant applications: Part 1 — Mechanical properties modelling](#), *Materials Science and Technology* **19** (3), 283–290 (2003), cf. pages 5, 21, 35, 77, 78, 103.
19. REED, R. C., TAO, T. & WARNKEN, N. [Alloys-By-Design: Application to nickel-based single crystal superalloys](#), *Acta Materialia* **57** (19), 5898–5913 (2009), cf. pages 5, 99.
51. DONACHIE, M. J. [Superalloys: A Technical Guide, 2nd Edition](#), American Society for Metals, Materials Park, OH (2002), ISBN : 978-0-87170-749-9, cf. pages 16, 67, 70.
70. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & van der ZWAAG, S. [Genetic alloy design based on thermodynamics and kinetics](#), *Philosophical Magazine* **88** (12), 1825–1833 (2008), cf. pages 21, 42, 76.
74. DEVAUX, A., PICQUÉ, B., GERVAIS, M. F., GEORGES, E., POULAIN, T. & HÉRITIER, P. [AD730™ — A new nickel based superalloy for high temperature engine rotative parts](#), *Superalloys 2012 (12th International Symposium on Superalloys)*, 911–919, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2012), cf. pages 21, 110, 116.
75. PATEL, S. J., DE BARBADILLO, J. J., BAKER, B. A. & GOLLIHUE, R. D. [Nickel base superalloys for next generation coal fired AUSC power plants](#), *Procedia Engineering* **55**, 246–252 (2013), cf. pages 21, 68.
143. NABNEY, I. [NETLAB: Algorithms for Pattern Recognition](#), Springer, New York (2002), ISBN : 978-1-85233-440-6, cf. pages 36, 79.
161. DEB, K. & AGRAWAL, R. B. Simulated Binary Crossover for Continuous Search Space, *Complex Systems* **9**, 115–148 (1995), cf. pages 46, 101.

162. DEB, K. & AGRAWAL, R. B. Real-coded Genetic Algorithms with Simulated Binary Crossover: Studies on Multimodal and Multiobjective Problems, *Complex Systems* **9**, 431–454 (1995), cf. pages 46, 101.
180. COELLO, C. A. C., LAMONT, G. B. & VAN VELDHUIZEN, D. A. *Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems Second Edition*, Springer US, New York (2007), ISBN : 978-0-387-33254-3, cf. pages 51, 100, 101.
181. SIMS, C. T. *A History of Superalloy Metallurgy for Superalloy Metallurgists, Superalloys 1984 (Fifth International Symposium)*, 399–419, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (1984), cf. page 65.
182. STEIN-BRZOZOWSKA, G., FLÓREZ, D. M., MAIER, J. & SCHEFFKNECHT, G. Nickel-base superalloys for ultra-supercritical coal-fired power plants: Fireside corrosion. Laboratory studies and power plant exposures, *Fuel* **108**, 521–533 (2013), cf. page 65.
183. DUPONT, J. N., LIPPOLD, J. C. & KISER, S. D. *Welding metallurgy and weldability of nickel-base alloys*, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey (2009), ISBN : 978-0-470-08714-5, cf. pages 66, 67, 71, 72, 74.
184. MORBIOLI, R. & WALTER, P. *Corrosion des superalliages : cas des aubes de turbines. Corrosion des matériaux à haute température* Éditions de Physique, Les Ulis (1987), ISBN : 978-2-86883-053-1, cf. pages 66, 76.
185. REED, R. C. *The Superalloys: Fundamentals and Applications*, Cambridge University Press, Cambridge (2006), ISBN : 978-0-521-07011-9, cf. pages 66, 67, 69, 70, 98.
186. JENA, A. K. & CHATURVEDI, M. C. The role of alloying elements in the design of nickel-base superalloys, *Journal of Materials Science* **19** (10), 3121–3139 (1984), cf. page 67.
187. MANIAR, G. N. & BRIDGE, J. E. Effect of gamma-gamma prime mismatch, volume fraction gamma prime, and gamma prime morphology on elevated temperature properties of Ni, 20 Cr, 5.5 Mo, Ti, Al alloys, *Metallurgical Transactions* **2** (1), 95–102 (1971), cf. pages 68, 98.
188. *Superalloys II: High-Temperature Materials for Aerospace and Industrial Power* (éds. SIMS, C. T., STOLOFF, N. S. & HAGEL, W. C.) John Wiley & Sons, Hoboken, NJ (1987), ISBN : 978-0-471-01147-7, cf. pages 68, 70, 71.
189. XU, Y., ZHANG, L., LI, J., XIAO, X., CAO, X., JIA, G. & SHEN, Z. Relationship between Ti/Al ratio and stress-rupture properties in nickel-based superalloy, *Materials Science and Engineering A* **544**, 48–53 (2012), cf. page 68.
190. BOUSE, G. K. Eta and platelet phases in investment cast superalloys, *Superalloys 1996 (Eighth International Symposium)*, 163–172, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (1996), cf. page 68.
191. SHINGLEDECKER, J. P. & PHARR, G. M. The role of eta phase formation on the creep strength and ductility of Inconel alloy 740 at 1023 K (750 °C), *Metallurgical and Materials Transactions A* **43** (6), 1902–1910 (2012), cf. page 68.
192. DAVIS, J. R. *Nickel, Cobalt, and Their Alloys*, American Society for Metals, Materials Park, OH (2000), ISBN : 978-0-87170-685-0, cf. page 70.
193. BRINK, C. & SHOEMAKER, D. P. A variation on the σ -phase structure: the crystal structure of the P phase, Mo–Ni–Cr, *Acta Crystallographica* **8** (11), 734–735 (1955), cf. page 70.
194. SHI, Q., HUO, J., CAO, L., LI, J., DING, X., ZHENG, Y. & FENG, Q. Compositional effect on TCP phase formation in Ru-containing Ni-based single crystal superalloys, *MATEC Web of Conferences* **14**, 1–6 (2014), cf. page 70.

195. RAE, C. M. F., KARUNARATNE, M. S. A., SMALL, C. J., BROOMFIELD, R. W., JONES, C. N. & REED, R. C. [Topologically close packed phases in an experimental rhenium-containing single crystal superalloy](#), *Superalloys 2000 (Ninth International Symposium)*, 767–776, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2000), cf. page 70.
196. BOESCH, W. J. & SLANEY, J. S. Preventing sigma phase embrittlement in nickel base superalloys, *Metal Progress* **86** (1), 109–111 (1964), cf. page 70.
197. WOODYATT, L. R., SIMS, C. T. & BEATTIE, H. J. The Prediction of Sigma-Type Phase Occurrence from Compositions in Austenitic Superalloys, *Transactions of the Metallurgical Society of AIME* **236**, 519, American Institute of Mining, Metallurgical, and Petroleum Engineers, New York (1966), cf. page 70.
198. MORINAGA, M., YUKAWA, N., ADACHI, H. & EZAKI, H. [NEW PHACOMP and its Applications to Alloy Design](#), *Superalloys 1984 (Fifth International Symposium)*, 523–532, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (1984), cf. page 71.
199. SAINDRENAN, G., LE GALL, R. & CHRISTIEN, F. [Endommagement interfacial des métaux : ségrégation interfaciale et conséquences](#) (éd. ELLIPSES) Paris (2002), ISBN : 978-2-7298-0911-9, cf. page 71.
200. RAPPAZ, M., DREZET, J. M. & GREMAUD, M. [A new hot-tearing criterion](#), *Metallurgical and Materials Transactions A* **30** (2), 449–455 (1999), cf. page 72.
201. RINDLER, W., KOZESCHNIK, E. & BUCHMAYR, B. Computer simulation of the brittle-temperature-range (BTR) for hot cracking in steels, *Steel Research* **71** (11), 460–465 (2000), cf. page 73.
202. TILLACK, D. J. Nickel alloys and stainless steels for elevated temperature service : weldability considerations, *Proceedings from Materials Solutions 97 on Joining and Repair of Gas Turbine Components*, American Society for Metals, Indianapolis, IN (1997), cf. page 74.
203. PRAGER, M. & SHIRA, C. S. [Welding of precipitation-hardening nickel base alloys](#), Welding Research Council, New York (1968), ISBN : 978-1-58145-127-6, cf. page 75.
204. GEORGE, S. & ERIC, J. W. Superalloys with improved oxidation resistance and weldability, US Patent N°6177046. (1998), cf. page 75.
205. SRINIVASAN, V. S., CHOUDHARY, B. K., MATHEW, M. D. & JAYAKUMAR, T. [Long-term creep-rupture strength prediction for modified 9Cr–1Mo ferritic steel and type 316L\(N\) austenitic stainless steel](#), *Materials at High Temperatures* **29** (1), 41–48 (2012), cf. page 89.
206. YOSHITAKE, S. & NARAYAN, V. Data Library MAP_DATA_LATTMISFIT. En ligne : <http://www.msm.cam.ac.uk/map/data/neural/lattmisfit-b.html> (visité le 10/07/2016) (1999), cf. pages 92, 95.
207. HULL, F. C. Estimating Alloy Densities, *Metal Progress* **59**, 139–140 (1969), cf. page 99.
208. GOEL, T. & STANDER, N. [A study on the convergence of multiobjective evolutionary algorithms](#), *Preprint submitted to the 13th AIAA/ISSMO conference on Multidisciplinary Analysis Optimization* (2010), cf. pages 102, 162.
209. THÉBAUD, L., VILLECHAISE, P., CORMIER, J., CROZET, C., DEVAUX, A., BÉCHET, D., FRANCHET, J. M., ORGANISTA, A. & HAMON, F. [Relationships between Microstructural Parameters and Time-Dependent Mechanical Properties of a New Nickel-Based Superalloy AD730™](#), *Metals* **5**, 2236–2251 (2015), cf. page 116.
210. FARINA, M. & AMATO, P. [On the optimal solution for many-criteria optimization problems](#), *Proceedings of the 2002 Annual Meeting of the North American Fuzzy Information Processing Society NAFIPS-FLINT 2002*, 233–238, Institute of Electrical & Electronics Engineers (2002), cf. pages 123, 206.

211. ISHIBUCHI, H., TSUKAMOTO, N. & NOJIMA, Y. [Evolutionary many-objective optimization: A short review](#), *2008 IEEE Congress on Evolutionary Computation, CRC 2008*, 2419–2426, Institute of Electrical & Electronics Engineers, New York City, NY (2008), cf. page 123.
212. DEB, K. & SAXENA, D. Searching for Pareto-optimal solutions through dimensionality reduction for certain large-dimensional multi-objective optimization problems, *Proceedings of the World Congress on Computational Intelligence (WCCI-2006)*, 3352–3360 (2006), cf. page 123.
213. GANDY, D. & SHINGLEDECKER, J. [Advances in Materials Technology for Fossil Power Plants: Proceedings from the Seventh International Conference](#), American Society for Metals, Materials Park, OH (2014), ISBN : 978-1-62708-060-6, cf. page 125.
214. XISHAN, X., CHI, C., YU, Q., YAO, Z., ZHANG, M., HU, Y., DONG, J., YU, H., ZHAO, S., LIN, F., LIU, X., MEI, L., YANG, H. & LI, M. [An investigation on structure stability of advanced austenitic heat-resisting steels and Ni-base superalloys for 600-700 °C A-USC power plant application](#), *Advances in Materials Technology for Fossil Power Plants: Proceedings from the Seventh International Conference*, 98–119, American Society for Metals, Materials Park, OH (2014), ISBN : 978-1-62708-060-6, cf. page 126.
215. MATYSIAK, H., ZAGORSKA, M., ANDERSSON, J., BALKOWIEC, A., CYGAN, R., RASINSKI, M., PI-SAREK, M., ANDRZEJCZUK, M., KUBIAK, K. & KURZYDŁOWSKI, K. [Microstructure of Haynes® 282® Superalloy after Vacuum Induction Melting and Investment Casting of Thin-Walled Components](#), *Materials* **6** (11), 5016–5037 (2013), cf. page 126.
216. ZHAO, J. C., RAVIKUMAR, V. & BELTRAN, A. M. [Phase precipitation and phase stability in Nimonic 263](#), *Metallurgical and Materials Transactions A* **32** (6), 1271–1282 (2001), cf. page 128.

Conception d'alliages à forte entropie 4

Après une brève introduction des alliages à forte entropie, ce chapitre liste les différents critères d'optimisation devant servir à leur conception. Les adaptations apportées à l'algorithme génétique, nécessaires à la bonne conduite de l'optimisation de ces alliages à la métallurgie particulière, sont ensuite détaillées. Deux cas d'optimisations sont traités : le premier est généraliste tandis que le second restreint la recherche à des alliages de structure cubique à faces centrées. Les résultats de ces optimisations sont discutés à la lumière des prédictions de la thermodynamique. Parmi les compositions optimales, sept alliages sont sélectionnés et fabriqués; les résultats des premières validations expérimentales sont enfin exposés.

Sommaire

4.1	Principe et intérêts des alliages à forte entropie	147
4.2	Critères de conception	149
4.2.1	Critères physicochimiques	149
4.2.2	Critère P_I	154
4.2.3	Critère P_F	155
4.2.4	Thermodynamique prédictive	156
4.2.5	Critère utilisé dans cette étude : critère P_{IF}	158
4.2.6	Autres critères de conception	160
4.3	Adaptation de l'algorithme génétique	160
4.3.1	Utilisation d'une population initiale partiellement déterministe	160
4.3.2	Régénération régulière de la population	161
4.3.3	Aspect combinatoire	162
4.3.4	Opérateur de mutation	165
4.3.5	Injection de cas	165
4.3.6	Autres paramètres de l'algorithme génétique	166
4.4	Optimisation d'alliages à forte entropie	166
4.4.1	Espace de recherche	166
4.4.2	Objectifs	166
4.4.3	Résultats	167
4.4.4	Confrontation des résultats avec la thermodynamique prédictive	171
4.4.5	Sélection d'alliages pour fabrication	176
4.5	Optimisation d'alliages à forte entropie de structure CFC	177
4.5.1	Résultats	178
4.5.2	Confrontation des résultats avec la thermodynamique prédictive	182

4.5.3	Sélection d'alliages CFC pour fabrication	187
4.6	Résultats préliminaires de la validation expérimentale	187
4.6.1	HEA CC 1	187
4.6.2	HEA CC 2	189
4.6.3	HEA CC 3	190
4.6.4	HEA CC 4	191
4.6.5	HEA CFC 1	193
4.6.6	HEA CFC 2	194
4.6.7	HEA CFC 3	197
4.6.8	Résumé des résultats	199
4.7	Synthèse	200
	Références	201

4.1 Principe et intérêts des alliages à forte entropie

Les alliages à forte entropie (*High Entropy Alloys*, HEA)⁴⁸ possèdent une métallurgie singulière comparée aux alliages standards : tandis que ces derniers reposent le plus souvent sur un élément de base majoritaire (le fer, le nickel, le titane, etc.), les alliages à forte entropie sont constitués d'éléments en nombre et en quantité tels qu'il n'existe plus à proprement parler d'élément de base.

Alors que les connaissances sur les diagrammes de phases binaires et ternaires laisseraient penser que le mélange de nombreux éléments métalliques conduit à la formation de multiples phases et en particulier de phases intermétalliques fragilisantes, il a été observé dans nombre de cas la genèse d'une unique solution solide. D'après Yeh *et al.*,⁴⁸ la raison de cette unicité peut se trouver dans l'énergie libre de Gibbs, qui indique la propension d'une phase à se former et à subsister dans un matériau. Cette énergie G peut s'écrire comme la soustraction de son enthalpie de formation H par le produit de son entropie S avec la température T :

$$G = H - TS \quad (4.1)$$

Le mélange de nombreux éléments dans une solution solide provoque l'augmentation de l'entropie de celle-ci, qui tend à diminuer son énergie libre de Gibbs et à rendre favorable sa formation. En particulier, les alliages à forte entropie tirent leur nom de l'augmentation de l'entropie de configuration provenant du mélange en proportions significatives de nombreux éléments. En effet, l'entropie de configuration est donnée par :

$$S_{\text{conf}} = -R \sum_{i=1}^n x_i \ln(x_i) \quad (4.2)$$

Avec :

- R la constante des gaz parfaits ;
- n le nombre d'éléments ;
- x_i la fraction de l'élément i dans l'alliage.

Cette relation met en évidence l'augmentation de S_{conf} avec le nombre d'éléments. Pour une valeur de n donnée, S_{conf} est maximale lorsque tous les x_i sont égaux. Par exemple, on trouve certains alliages à forte entropie pour des compositions équimolaires ($x_i = x_j \forall i, j$) à plus de cinq éléments tels AlCoCuNiTiZn²¹⁷ ou CoCrCuFeMnNi.²¹⁸

Les alliages équimolaires ne sont toutefois pas les seuls à constituer des alliages à forte entropie. Ces derniers font plus généralement partie de la famille d'alliages dits « à composants principaux multiples » (*multiprincipal component alloys*) ou « alliages à composants hautement concentrés multiples » (*highly concentrated multicomponent alloys*). Les alliages à composants multiples sont étudiés depuis plusieurs dizaines d'années.^{219,220} Les premières approches de conception de ces alliages ont été formalisées ultérieurement par Cantor *et al.*²¹⁸ et Yeh *et al.*⁴⁸ Ces derniers proposent la dénomination de « HEA » accompagnée de la définition suivante, destinée à « exploiter au mieux les mérites d'une haute entropie de configuration dans l'état solide⁴⁸ » : (i) un HEA doit comporter au moins cinq éléments (ii) dont les teneurs doivent être comprises entre 5 et 35 %_{at.} ; (iii) un HEA ne doit être constitué que d'une seule solution solide. Une trentaine d'éléments du tableau périodique peuvent entrer dans la composition des alliages à forte entropie ; cette définition regroupe ainsi plusieurs centaines de milliers de familles d'alliages. Par exemple, parmi quinze éléments, le nombre de familles d'alliages comportant au moins cinq éléments à concentration égale s'élève à :

$$\sum_{n=5}^{15} \binom{n}{15} = 30\,827 \quad (4.3)$$

Il en résulte une évidente complexité combinatoire qui sera discutée dans les sections à venir.

Les mérites évoqués sont, selon Yeh *et al.*,⁴⁸ au nombre de quatre. Il s'agirait de la combinaison :

- d'un effet thermodynamique : l'effet « haute entropie », qui conduit à la rétention d'une seule solution solide au lieu d'intermétalliques alors que le nombre de phases devrait augmenter avec le nombre d'éléments. Cet effet serait ainsi responsable de l'élargissement des domaines de solubilité des éléments dans une même solution solide ;
- d'un effet structural : une distorsion de la maille cristalline importante, causée par la juxtaposition d'éléments de taille différente (figure 4.1). Cette déformation contribue au renforcement par solution solide des alliages ;
- d'un effet cinétique : le ralentissement des phénomènes de diffusion, notamment à cause de la distorsion de la maille. La résistance de ces alliages à la corrosion s'en trouverait bonifiée puisqu'elle est en partie dépendante de la migration d'éléments réactifs dont le déplacement se trouve entravé. La lenteur des phénomènes diffusionnels contribue également à la conservation de certaines propriétés à haute température ;
- d'un effet dit « cocktail », qui confère des propriétés aux mélanges d'éléments inatteignables si ces mêmes éléments étaient utilisés séparément ; à noter que cet effet à la définition vague (à la base du principe même de n'importe quel alliage) regroupe au minimum les deux points ci-dessus.

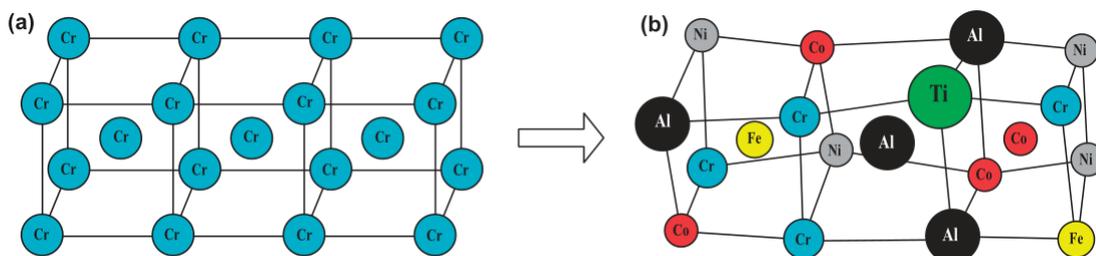


Figure 4.1 — Illustration de l'effet de distorsion d'une structure cubique centrée : à gauche, la maille « parfaite » d'un métal pur (le chrome) ; à droite, la même maille sévèrement distordue à cause du mélange de nombreux types d'atomes de taille différente (aluminium, chrome, cuivre, fer, nickel et titane) distribués aléatoirement sur les sites de la maille. Figure adaptée de la référence 221.

Il faut savoir que ces effets mis en avant par Yeh *et al.*⁴⁸ sont toujours source de discussions et que certains ont été réfutés expérimentalement.²²²

Néanmoins, l'attrait des alliages à forte entropie réside dans cette possible combinaison d'effets qui leur confère des propriétés variées tantôt proches des alliages d'aluminium, tantôt similaires aux superalliages à base de nickel ou aux alliages réfractaires.⁴⁹ Cette singularité a entraîné l'essor de leur développement ; comme dans le cas des superalliages, cette conception est rendue difficile par l'espace titanique des compositions possibles. De surcroît, la relative jeunesse de ce type d'alliages signifie que, comparativement aux alliages basés sur un seul élément, relativement peu de données sont aujourd'hui disponibles, notamment sur les relations entre composition, microstructure et propriétés ; en conséquence, le recours à des outils prédictifs présente plusieurs difficultés.

En outre, la stabilité d'une phase au sein d'un alliage n'est pas uniquement déterminée par son entropie S . Non seulement l'entropie de configuration n'est qu'une composante de l'entropie totale S de la phase, mais l'enthalpie H entre également en compte dans le calcul de son énergie libre de Gibbs G . Par extension, la dénomination « HEA » apparaît quelque peu abusive ; celle-ci sera

néanmoins utilisée par la suite, de façon synonyme à l'appellation « alliages à composants principaux multiples à solution solide unique ». La conception d'alliages à forte entropie ne pouvant donc être guidée que par la seule entropie de configuration, d'autres critères physicochimiques ont été proposés; la section suivante les introduit.

4.2 Critères de conception

Dans un premier temps, neuf critères physicochimiques existants destinés à guider le développement d'alliages à forte entropie sont présentés. L'exploitation de ces neuf grandeurs amenant au principal critère de conception utilisé dans cette étude est ensuite détaillée. Cette exploitation a été conduite en collaboration avec l'université de Cambridge et ses résultats n'ont pas encore été publiés; elle est donc décrite en détail dans ce chapitre.

4.2.1 Critères physicochimiques

Parmi les critères les plus utilisés pour déterminer la propension de deux métaux à former une solution solide se trouvent les règles de Hume-Rothery.²²³ Certaines ont été adaptées et appliquées aux alliages à forte entropie dans lesquels plus de deux éléments cohabitent. La solubilité complète de ces éléments requiert l'adéquation de certaines de leurs caractéristiques physicochimiques tels leur rayon atomique, leur électronégativité et leur valence.

4.2.1.1 Désaccord moyen entre rayons atomiques

Le rayon des atomes de chaque élément ne doit pas différer significativement du « rayon moyen » de la solution; autrement dit, la différence moyenne de rayon atomique δ (ou désaccord de rayon atomique, *atomic size mismatch*) doit être faible^{221,224} :

$$\delta = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i \left(1 - \frac{r_i}{\bar{r}}\right)^2} \quad (4.4)$$

avec

$$\bar{r} = \sum_{j=1}^n x_j r_j \quad (4.5)$$

x_i étant la fraction atomique de l'élément i , r_i son rayon atomique, n le nombre d'éléments et \bar{r} le rayon moyen. Un élément dont le rayon s'écarte excessivement du rayon moyen tend à perturber l'équilibre de la solution; du point de vue de la stabilité globale, la formation d'une autre phase incluant l'élément en question sera préférée.

4.2.1.2 Désaccord moyen entre électronégativités

L'électronégativité quantifie la tendance d'un élément à attirer les électrons des atomes voisins. De manière identique au rayon atomique, le « désaccord entre électronégativités » (*electronegativity mismatch*) $\Delta\chi$ entre les différents éléments de l'alliage doit être minimal,^{224,225} une forte différence conduisant à la formation d'intermétalliques :

$$\Delta\chi = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i \left(1 - \frac{\chi_i}{\bar{\chi}}\right)^2} \quad (4.6)$$

avec

$$\bar{\chi} = \sum_{j=1}^n x_j \chi_j \quad (4.7)$$

χ_i étant l'électronégativité de l'élément i et $\bar{\chi}$ l'électronégativité moyenne.

4.2.1.3 Similarité des concentrations moyennes d'électrons

La solubilité complète des éléments d'un alliage implique également que leur valence — le nombre d'électrons disponibles pour la création d'une liaison chimique — soit identique. Cette nécessité est traduite par deux critères²²⁵⁻²²⁷ : la concentration moyenne en électrons de valence (*valence electron concentration*, VEC) :

$$\text{VEC} = \sum_{i=1}^n x_i \text{VEC}_i \quad (4.8)$$

et le nombre moyen d'électrons itinérants par atome e/a :

$$e/a = \sum_{i=1}^n x_i (e/a)_i \quad (4.9)$$

VEC_i et $(e/a)_i$ représentent respectivement la concentration en électrons de valence et le nombre d'électrons itinérants (de valence) de l'élément i . Le calcul du nombre d'électrons de valence diffère selon ces deux quantités : VEC inclut les électrons des bandes d à l'inverse de e/a .²²⁸ Le critère VEC a notamment été relié à la structure préférentielle adoptée par un HEA^{225,226} (cf. figure 4.4).

4.2.1.4 Similarité des structures cristallines

Il est à noter que, contrairement à la règle originelle de Hume-Rothery concernant les alliages binaires, la structure cristalline des éléments d'un alliage multiconstitué ne doit pas nécessairement être identique pour conduire à la formation d'une solution solide. En effet, il a été rapporté des cas où des solutions solides sont formées à partir d'éléments de structures différentes ; ainsi $\text{AlCoCrCu}_{0,5}\text{Ni}$ s'organise selon une maille cubique centrée²²⁹ alors que seul le chrome pur possède cette structure, la maille du cobalt étant hexagonale ou cubique à faces centrées selon la température, tous les autres éléments possédant une structure cubique à faces centrées. Cette règle est ainsi ignorée dans le cas des alliages à forte entropie.

D'autres règles basées sur des concepts thermodynamiques ont été établies pour guider la formation de solutions solides.

4.2.1.5 Minimisation de l'enthalpie de mélange

L'usage de l'enthalpie de mélange moyenne ΔH_{mix} a été proposé par Zhang *et al.*²²¹ parce que cette quantité contribue au même titre que l'entropie à l'énergie libre de Gibbs déterminant la stabilité d'une phase :

$$\Delta H_{\text{mix}} = 4 \sum_{i,j=1;j \neq i}^n \Delta H_{ij} x_i x_j \quad (4.10)$$

Le terme ΔH_{ij} est l'enthalpie de réaction des éléments i et j , qu'il est possible de calculer en usant du modèle de Miedema.²³⁰

4.2.1.6 Proportion des contributions entropique et enthalpique

La stabilisation d'une phase implique la minimisation de son énergie libre de Gibbs; celle-ci se traduit simultanément par la minimisation de l'enthalpie et la maximisation de l'entropie et de la température. Le ratio Ω des contributions entropique et enthalpique ΔS_{mix} et ΔH_{mix} peut ainsi servir de critère guide :²³¹

$$\Omega = \frac{T_m \Delta S_{\text{mix}}}{|\Delta H_{\text{mix}}|} \quad (4.11)$$

T_m étant la température de fusion de l'alliage.

4.2.1.7 Écart à la température de décomposition spinodale

En considérant qu'il est possible qu'une seconde phase se forme par décomposition spinodale, c'est-à-dire par démixtion de la solution homogène, certains auteurs ont proposé un critère additionnel : le ratio μ entre la température de fusion T_m et la température critique de décomposition spinodale T_{SC} :²²⁷

$$\mu = \frac{T_m}{T_{\text{SC}}} \quad (4.12)$$

Celui-ci renseigne sur la largeur de la plage de température entre la fusion et la décomposition spinodale. Sa maximisation (avec $\mu > 1$) favoriserait la formation d'une solution solide en élargissant la plage de stabilité de celle-ci; à l'inverse, dans le cas extrême où $\mu = 1$, une solution solide homogène ne peut pas exister en phase solide puisque la décomposition intervient à une température égale à la température de fusion.

Plus récemment, deux critères additionnels ont été établis; leur pertinence a été évaluée sur un grand nombre d'alliages à forte entropie.²³²

4.2.1.8 Désaccord moyen entre distances interatomiques

Le mélange d'éléments de rayon atomique et d'électronégativité différentes conduit à la distorsion de la maille dans laquelle la distance entre atomes varie d'un point à un autre. Le désaccord de distance interatomique s_m (*interatomic spacing mismatch*) a ainsi été défini :

$$s_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \left| 1 - \frac{s_{ij}^d}{s_{\text{lat}}} \right| \quad (4.13)$$

s_{ij}^d étant la distance interatomique moyenne entre les atomes des espèces i et j et s_{lat} la distance interatomique moyenne globale de l'alliage (prenant en compte toutes les interactions d'ordre deux s_{ij}^d). Ce critère est proche du désaccord moyen entre rayons atomiques puisque la taille des atomes contribue pour partie à leur espacement; ces deux critères varient ainsi sur des plages proches et leur interprétation est similaire.²³²

4.2.1.9 Désaccord moyen entre modules d'élasticité isostatique

La distorsion effective de la maille dépend de sa capacité à se déformer localement pour accommoder élastiquement les différents espacements interatomiques. Cette capacité est liée au module

d'élasticité isostatique dont la différence moyennée K_m (*bulk modulus mismatch*) a aussi été proposée comme critère pour confirmer la stabilité d'une solution solide :

$$K_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \left| 1 - \frac{K_{ij}^d}{K_{\text{lat}}} \right| \quad (4.14)$$

K_{ij}^d représentant le module d'élasticité isostatique moyen entre les atomes des espèces i et j à l'équilibre et K_{lat} le module d'élasticité isostatique moyen global de l'alliage. Un désaccord K_m peu élevé indique que les contributions K_{ij}^d sont proches de la moyenne K_{lat} , c'est-à-dire que chaque paire d'éléments dispose d'une capacité d'accommodation similaire; les éléments sont « compatibles » et peuvent demeurer au sein d'une même solution. À l'opposé, il peut devenir préférable pour certains éléments de former une seconde phase minimisant leurs contributions K_{ij}^d qui s'éloignent excessivement de la moyenne K_{lat} de la première phase.

La comparaison quantitative de tous les critères mentionnés précédemment a été conduite sur plus de trois cents alliages à composants principaux multiples.²³² Ces travaux ont montré l'incapacité de chacun de ces critères, pris individuellement, à prédire de manière fiable la formation d'un alliage à forte entropie. La considération d'au moins deux critères, à l'aide de cartes bidimensionnelles, est nécessaire afin d'identifier les régions où se trouvent les HEA en proportions notables.^{221,225-227} Cependant, les régions ainsi délimitées contiennent généralement aussi des alliages de constitutions diverses (plusieurs solutions solides et/ou des intermétalliques, voire des verres métalliques) comme peut être constaté sur les figures 4.2 et 4.3. Sur ces figures, les régions grisées contiennent la majeure partie des alliages à forte entropie avérés de la base de données de l'étude comparative de Toda-Caraballo & Rivera-Díaz-del-Castillo²³² (HEA, en bleu), tout en incorporant quantité d'alliages à la constitution incompatible avec la définition d'un HEA : plusieurs solutions solides (SS, en vert) ou intermétalliques et verres métalliques (*Others*, en rouge).

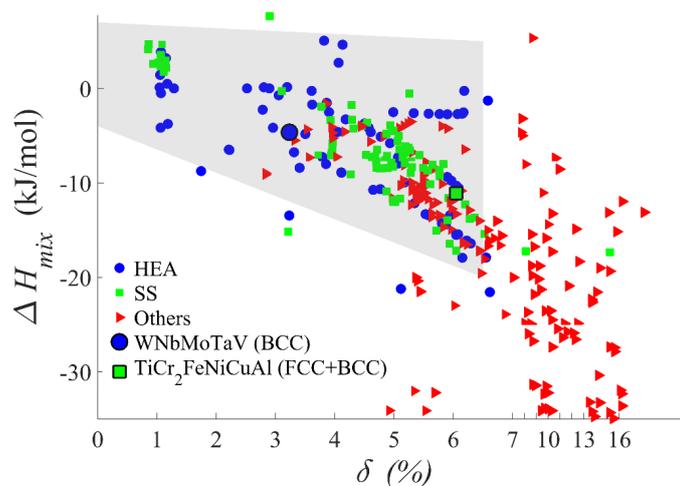


Figure 4.2 — Carte bidimensionnelle proposée par Zhang *et al.*²²¹ représentant l'évolution de l'entropie de mélange ΔH_{mix} des alliages de la base de données décrite dans l'étude comparative de Toda-Caraballo & Rivera-Díaz-del-Castillo²³² en fonction du désaccord moyen entre les rayons atomiques de leurs constituants δ . La zone grisée contient la plupart des alliages à forte entropie avérés, tout en incorporant de nombreux alliages à la constitution indésirable.

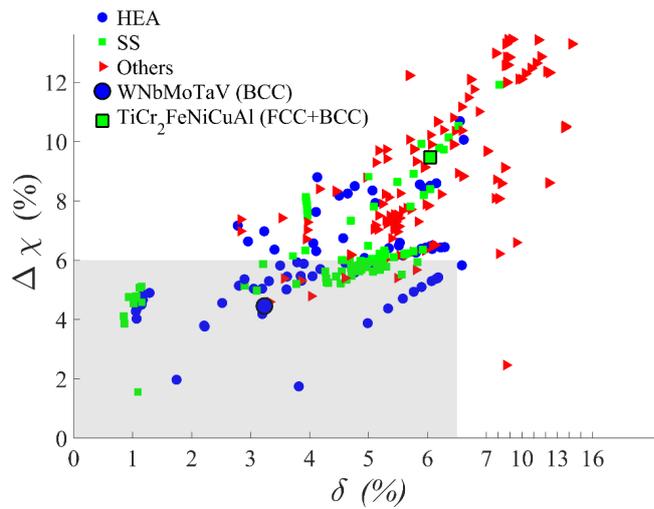


Figure 4.3 — Carte bidimensionnelle proposée par Guo & Liu²²⁵ où le désaccord moyen entre électronégativités $\Delta\chi$ des alliages de la base de données décrite dans l'étude comparative de Toda-Caraballo & Rivera-Díaz-del-Castillo²³² est représenté en fonction du désaccord moyen δ entre les rayons atomiques de leurs constituants. La zone grisée contient la plupart des alliages à forte entropie avérés mais comprend également des alliages à la constitution indésirable.

La figure 4.4, représentant l'évolution du nombre moyen d'électrons itinérants e/a en fonction de la concentration moyenne en électrons de valence VEC, amène aux mêmes conclusions : aucun paramètre considéré individuellement, ni un unique couple de paramètres ne peuvent guider de façon suffisamment sûre la conception d'alliages à forte entropie.

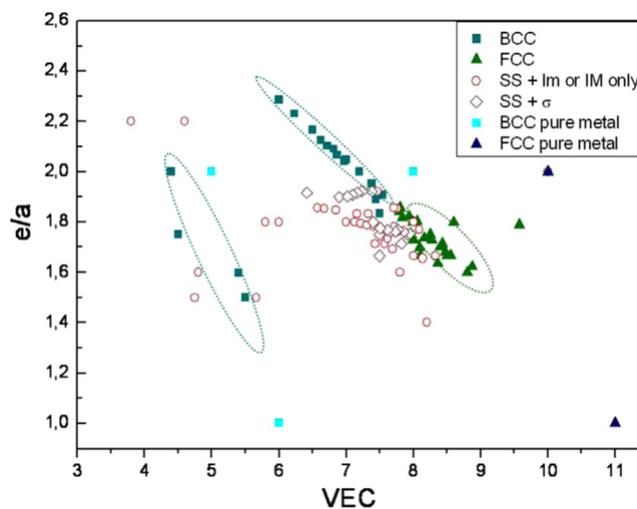


Figure 4.4 — Nombre moyen d'électrons itinérants e/a en fonction de la concentration moyenne en électrons de valence VEC.²²⁷ Les ellipses délimitent des zones où se trouvent des alliages à solution solide unique. Ces régions englobent un nombre également important d'alliages à la constitution indésirable.

En revanche, une analyse en composantes principales conduite sur un à cinq de ces paramètres a montré que la prise en compte simultanée d'un grand nombre de critères augmentait les chances de prédire correctement le caractère homogène (ou inhomogène) d'un alliage multicomposants.²³³ Augmenter le nombre de critères pris en compte simultanément semble donc améliorer la fiabilité des prédictions de la formation d'une unique solution solide. Les deux critères exposés dans les

sections suivantes sont basés sur ce constat et combinent tous les critères présentés jusqu'ici.

4.2.2 Critère P_1

À partir des cartes bidimensionnelles présentant les paires de critères $\langle \delta, \Delta H_{\text{mix}} \rangle$,²²¹ $\langle \delta, \Delta \chi \rangle$,²²⁵ $\langle \delta, \Omega \rangle$,²³¹ $\langle \delta, \mu \rangle$ ²²⁷ et $\langle s_m, K_m \rangle$,²³² il est possible de délimiter les régions dans lesquelles se trouve la majeure partie des alliages à forte entropie rassemblés dans la base de données compilée par Toda-Caraballo & Rivera-Díaz-del-Castillo²³². L'intérêt de la délimitation de ces régions pour la conception d'alliages provient de l'idée que si un alliage de composition inédite (c'est-à-dire hors de la base de données) est localisé dans certaines des régions où est située la majeure partie des alliages monophasés avérés, alors sa microstructure est probablement également monophasée. Il est à noter que la présence d'un alliage dans une de ces régions ne garantit pas sa présence dans toutes; par exemple, l'alliage $\text{TiCr}_2\text{FeNiCuAl}$ est inclus dans la « région HEA » sur le graphe $\langle \delta, \Delta H_{\text{mix}} \rangle$ (figure 4.2) mais pas sur celle du graphe $\langle \delta, \Delta \chi \rangle$ (figure 4.3).

Il apparaît alors pertinent de définir un critère unique synthétisant la localisation d'un alliage sur tous les graphes bicritères. Les résultats d'une étude de Toda-Caraballo & Rivera-Díaz-del-Castillo²³² non publiée concernant le calcul de ce critère ont été obtenus dans le cadre d'une collaboration avec l'université de Cambridge et sont détaillés ci-après. Les auteurs de ce travail ont calculé la position de tous les alliages de la base de données sur chacun des graphes bicritères, et ont quantifié la fréquence de quatre événements possibles dépendant de cette position :

- un HEA avéré est localisé dans une région où ceux-ci sont majoritaires (cf. zones grisées des figures 4.2 et 4.3);
- un HEA avéré est localisé en dehors des régions où ceux-ci sont majoritaires;
- un non-HEA avéré (tel un alliage multiphasé ou un verre métallique) est localisé dans une région où les HEA avérés sont majoritaires;
- un non-HEA avéré est localisé en dehors des régions où les HEA avérés sont majoritaires;

De façon similaire à l'alliage $\text{TiCr}_2\text{FeNiCuAl}$, un HEA avéré peut être situé dans une région « HEA » d'un premier graphe et une « non-HEA » d'un second. Les alliages multicomposants de la base de données sont ainsi triés en fonction du nombre de graphes sur lesquels ils sont classés à juste titre parmi les HEA selon leurs paramètres physicochimiques. Un alliage de la base de données peut donc être classé HEA selon une à cinq paires de paramètres. Pour chacune de ces paires, les fréquences des quatre événements calculées précédemment servent à établir une probabilité qu'un alliage soit un HEA. Par exemple, sur les 47 alliages présents dans toutes les régions majoritairement HEA selon toutes les paires de critères, 21 sont effectivement à forte entropie (c'est-à-dire qu'ils respectent la définition de Yeh),⁴⁸ ce qui correspond à une probabilité d'être un HEA de 45 %. Cette méthode permet entre autres de prendre en considération des cas similaires à celui de l'alliage $\text{TiCr}_2\text{FeNiCuAl}$, présent dans la « région HEA » sur le graphe $\langle \delta, \Delta H_{\text{mix}} \rangle$ mais pas sur celle du graphe $\langle \delta, \Delta \chi \rangle$. La probabilité résultante, désignée P_1 , indique si un alliage est situé dans les régions de paramètres dans lesquelles la plupart des HEA ont été observés. Le terme de « probabilité » sera ici utilisé par abus de langage même si la méthode n'en donne qu'une indication approchée.

Afin de confirmer la performance de ce critère, Toda-Caraballo & Rivera-Díaz-del-Castillo²³² ont calculé P_1 pour tous les alliages listés dans la référence 232. Les alliages ont été classés par ordre croissant de P_1 , ce critère étant ensuite représenté dans l'ordre des alliages (figure 4.5). Sur cette figure, les alliages à forte entropie avérés sont représentés en bleu, les alliages constitués de plusieurs solutions solides en vert et les alliages ne contenant pas que des solutions solides en rouge.

La figure 4.5 montre que la proportion de HEA augmente avec P_1 et qu'un certain degré de performance est atteint : environ la moitié des alliages ayant un P_1 supérieur à 0,9 (c'est-à-dire une

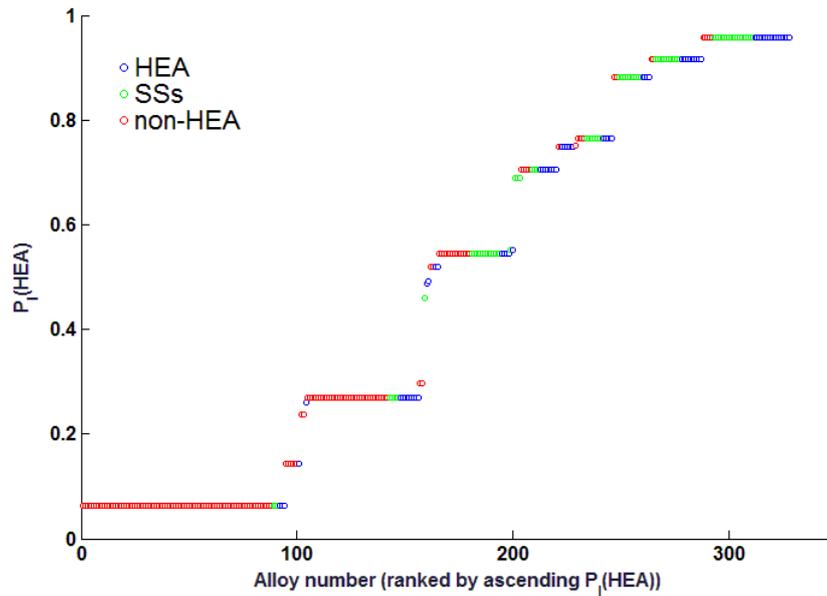


Figure 4.5 — Probabilité P_I qu'un alliage de la base de données ait une constitution compatible avec la définition des alliages à forte entropie selon qu'il soit HEA confirmé (*HEA*, en bleu) ou infirmé (*non-HEA*, en rouge) ou qu'il soit constitué de plusieurs solutions solides (SSs, en vert). Figure issue des travaux de Toda-Caraballo.²³⁴

forte probabilité d'être HEA) sont des HEA avérés. Cependant, il n'existe pas de seuil permettant d'identifier strictement les HEA. Ainsi, même si ce critère fournit une tendance intéressante, il n'est pas suffisant en vue d'une conception robuste pour laquelle le nombre d'alliages prédits HEA mais se révélant multiphasés doit être minimal.

Néanmoins, un seuil de 0,6 permet de séparer la plupart des alliages constitués d'une ou plusieurs solutions solides des alliages formant des intermétalliques (figure 4.5). Le respect de la condition $P_I \geq 0,6$ permet ainsi de s'assurer que l'alliage se situe dans une région de l'espace des paramètres où un grand nombre de HEA et d'alliages constitués uniquement de solutions solides ont été observés expérimentalement.

4.2.3 Critère P_F

Dans l'optique de fournir un scalaire permettant la prédiction fiable du caractère monophasé (ou non) d'un alliage à composants principaux multiples, Tancret²³⁵ a proposé l'établissement d'un modèle de régression par processus gaussiens prenant en considération les neuf paramètres déjà évoqués : δ , $\Delta\chi$, e/a , VEC, ΔH_{mix} , Ω , μ , s_m et K_m . Ce travail, également effectué dans le cadre d'une collaboration avec l'université de Cambridge, n'est pas encore publié; ses grandes lignes sont donc présentées ci-après. La probabilité résultante diffère de la précédente (P_I) par le traitement opéré sur les paramètres physicochimiques.

Le modèle, entraîné sur la base de données ayant servi à la définition du critère P_I , a pour entrées lesdits paramètres et pour sortie une variable P_F indiquant si une solution solide unique a été observée. Cette variable, identifiée à partir de données binaires — un alliage est HEA ou ne l'est pas —, est modélisée de façon continue par les processus gaussiens; cette continuité reflète l'entremêlement des HEA et non-HEA dans l'espace qui empêche le modèle, pour un jeu de paramètres particulier, d'être catégorique. Par rapport à la probabilité P_I , l'avantage des processus gaussiens

réside notamment dans leur capacité de généralisation leur permettant de déduire des tendances à partir des observations même si celles-ci sont éparses, ce qui est le cas ici.

De façon identique à la figure 4.5, la probabilité P_F a été calculée pour tous les alliages de la base de données qui ont ensuite été classés par ordre croissant de P_F ; cette dernière a été tracée en fonction dudit classement sur la figure 4.6.

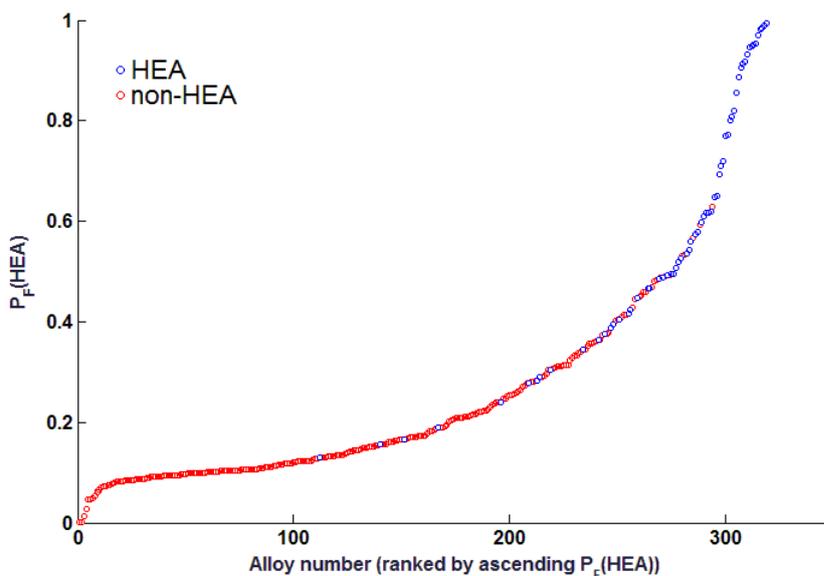


Figure 4.6 — Probabilité P_F qu’un alliage de la base de données ait une constitution compatible avec la définition des alliages à forte entropie selon qu’il soit HEA confirmé (*HEA*, en bleu) ou infirmé (*non-HEA*, en rouge). Figure issue des travaux de Tancret.²³⁵

Le critère P_F apparaît plus discriminatoire que P_I : en effet, au-delà d’un seuil de $\sim 0,6$ se trouvent presque uniquement des alliages à solution solide unique ; leur nombre représente presque la moitié de tous les HEA de la base de données. L’existence d’un seuil laisse penser que ce critère peut être utilisé de manière relativement fiable dans le cadre de la conception d’alliages à forte entropie.

4.2.4 Thermodynamique prédictive

La métallurgie singulière des alliages à composants principaux multiples se traduit par la mise en évidence d’un problème inhérent à la méthode de calcul des diagrammes de phases. Parce que les alliages métalliques traditionnels reposent sur un unique constituant de base, les bases de données thermodynamiques usuelles ne se concentrent qu’autour d’un élément (autrement dit, « dans un coin des diagrammes de phase⁸¹ »). Par exemple, le calcul des diagrammes de phases quinaires est ardu si les teneurs en éléments sont de l’ordre de 20 % chacune ; en effet, de telles teneurs placent l’alliage dans une zone « centrale » du diagramme, éloignée des domaines couramment exploités pour la prédiction de l’équilibre dans les alliages standards. La prédiction fiable de l’équilibre thermodynamique dans les alliages à forte entropie, qui contiennent au moins cinq éléments en fortes proportions, impose la validité des bases de données thermodynamiques sur une plus large gamme de composition, ce qui implique la détermination d’un nombre plus important de diagrammes d’ordre deux, trois ou supérieur. En outre, le faible nombre d’alliages à forte entropie (comparé aux possibilités) ayant fait l’objet de vérifications expérimentales jusqu’à maintenant (Toda-Caraballo & Rivera-Díaz-del-Castillo²³² en comptent seulement plusieurs dizaines) implique que l’extrapolation des données thermodynamiques dans le cas de ces alliages est également incertaine.

Quelques bases de données thermodynamiques ont été constituées pour assister le développement d'alliages à forte entropie. Cependant, cette assistance est limitée : certaines bases sont en effet cantonnées à une famille particulière, par exemple Al-Co-Cr-Fe-Ni²³⁶ ; d'autres considèrent un nombre restreint de phases²³⁷ ou d'éléments²³⁸ ; enfin, certaines sont des sous-ensembles de bases existantes spécifiques à d'autres familles d'alliages, comme la base TCHEA de Thermo-Calc reprise de la base dédiée aux alliages de nickel TCNI8.²³⁹

L'établissement d'une base spécifique étant difficile, certains travaux ont eu recours aux bases de données thermodynamiques standards, *a priori* non-adaptées aux HEA, de manière à assister leur conception « au mieux » et à moindre coût. Par exemple, Gao & Alman⁷⁹ ont utilisé TTNI8 pour s'assurer de la stabilité de solutions solides dans le système Co-Cr-Fe-Mn-Ni. Miracle *et al.*⁵⁰ ont adopté une approche systématique dans laquelle la méthode CALPHAD est exploitée pour identifier de possibles alliages à forte entropie en estimant le nombre de phases d'un grand nombre de candidats.

La vérification de la performance de plusieurs bases de données standards a été menée récemment par Tancret²³⁵ sur les alliages de la base précédemment utilisée pour la comparaison des critères physicochimiques.²³² La capacité de quatre bases de données distribuées par Thermo-Calc à identifier des alliages à forte entropie a été comparée ; il s'agit de :

- deux bases dédiées aux alliages de nickel : TCNI7⁸⁵ et TTNI8⁸⁶ ;
- une base dédiée aux alliages de fer : TCFE8⁸⁷ ;
- une base généraliste : SSOL5.⁸⁸

Ces bases de données sont *a priori* inadaptées au calcul dans les systèmes caractéristiques des alliages à forte entropie ; leur usage est néanmoins susceptible de permettre l'obtention de résultats exploitables,⁵⁰ à défaut d'une base de données extensive et spécifiquement consacrée aux HEA.

Les résultats de la vérification de la performance des bases sont représentés sur la [figure 4.7](#). Pour chaque base, l'occurrence de quatre événements est calculée :

- le nombre de prédictions en accord avec les observations expérimentales :
 - le nombre de HEA avérés prédits HEA (barre bleue à gauche) ;
 - le nombre de non-HEA avérés prédits non-HEA (barre bleue à droite) ;
- le nombre de prédictions en désaccord avec les observations :
 - le nombre de HEA avérés prédits non-HEA (barre rouge à gauche) ;
 - le nombre de non-HEA avérés prédits HEA (barre rouge à droite).

Ces résultats montrent qu'aucune base de données thermodynamiques ne prédit avec un haut niveau de confiance la formation (ou la non-formation) constatée expérimentalement d'un alliage à forte entropie (barres bleues du côté HEA). Pour les alliages effectivement HEA, TCFE8 est la base la plus performante, prédisant la formation d'une solution solide dans 63 % des cas où celle-ci a été observée expérimentalement. Les prédictions des bases TCNI7 et TTNI8 sont bonnes dans 48 % et 41 % des cas, tandis que 28 % de celles de SSOL5 sont correctes.

Dans une optique de conception d'alliage, le risque serait cependant qu'un alliage prédit HEA ne forme pas une solution solide en réalité. Ce risque est proportionnel à la hauteur des barres rouges de la [figure 4.7](#), côté *non-HEA*. Plus ces barres sont importantes et plus la proportion d'alliages prédits HEA et se révélant multiphasés est grande. Inversement, plus les barres foncées sont hautes et plus le nombre d'alliages incorrectement estimés HEA est petit. À cet égard, la base SSOL5 est la plus précise, permettant l'identification de 100 % des alliages non-HEA. Les estimations de TCFE8 sont les moins précises avec 26 % d'erreurs ; celles de TCNI7 et de TTNI8 sont bonnes, avec respectivement 6 % et 4 % de prédictions erronées.

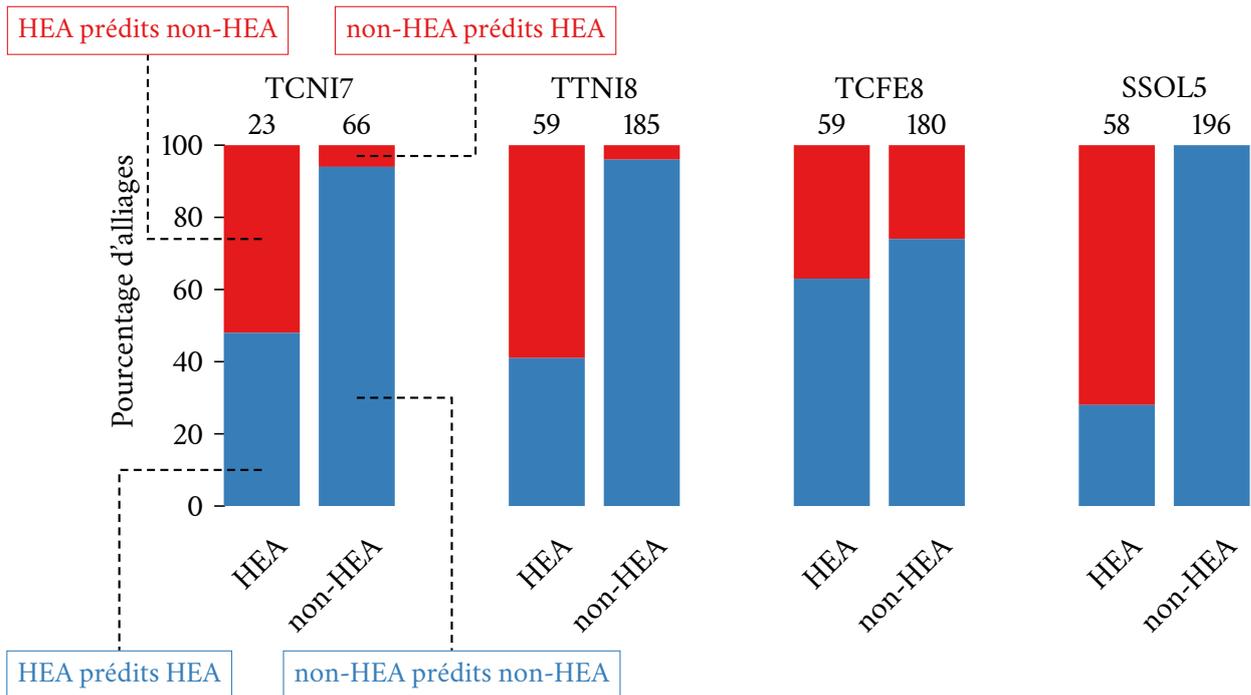


Figure 4.7 — Prédictions correctes (barres bleues) et incorrectes (barres rouges) de la formation d'un HEA ou d'un non-HEA. Plus la barre bleue s'approche de 100 % et plus la capacité prédictive de la base de données thermodynamiques est bonne. Le nombre d'alliages dans chaque catégorie est indiqué au sommet des barres.

4.2.5 Critère utilisé dans cette étude : critère P_{IF}

Si la probabilité P_F semble être la plus pertinente pour la conception d'alliages à forte entropie, la probabilité P_I peut néanmoins la compléter : la première quantité fournit, par interpolation, une estimation de la plausibilité de l'existence d'une seule solution solide; elle demeure toutefois un critère statistique qui, à ce titre, est susceptible de se tromper. La seconde renseigne sur la position des alliages par rapport aux domaines de stabilité déterminés à partir des cartes de paramètres. Afin de maximiser les chances de concevoir des alliages à forte entropie, c'est-à-dire de minimiser les possibilités qu'un alliage prédit HEA se révèle multiphasé, il semble avantageux, au vu des observations précédentes sur l'amélioration de la qualité des prédictions avec le nombre de paramètres considérés, de combiner autant d'outils prédictifs que possible.

Dans cette logique, Tancret²³⁵ a confronté les résultats des critères P_I et P_F aux prédictions thermodynamiques issues des quatre bases de données utilisées précédemment, de manière à trouver les seuils de P_I et P_F au-delà desquels les alliages prédits HEA par la thermodynamique prédictive sont effectivement monophasés. Cette comparaison a permis de déterminer qu'une valeur de $P_F \approx 0,59$ est suffisante pour garantir la justesse des prédictions thermodynamiques (figure 4.8), quelle que soit la valeur de P_I .

Comparée à la figure 4.7 où les prédictions de tous les alliages de la base de données étaient présentées, la capacité de prédiction de la formation d'une unique solution solide augmente en considérant seulement les alliages pour lesquels P_F est supérieure à 0,59 : en effet, la constitution de 63 à 80 % des alliages est alors correctement prédite par CALPHAD (cf. barres bleues HEA). Identiquement, l'identification des non-HEA est plus précise (cf. barres bleues non-HEA). Si, par sécurité, les résultats des quatre bases de données thermodynamiques sont combinés, la performance de prédiction d'une seule solution solide atteint 70 % pour les alliages dont P_F est supérieure à 0,59.

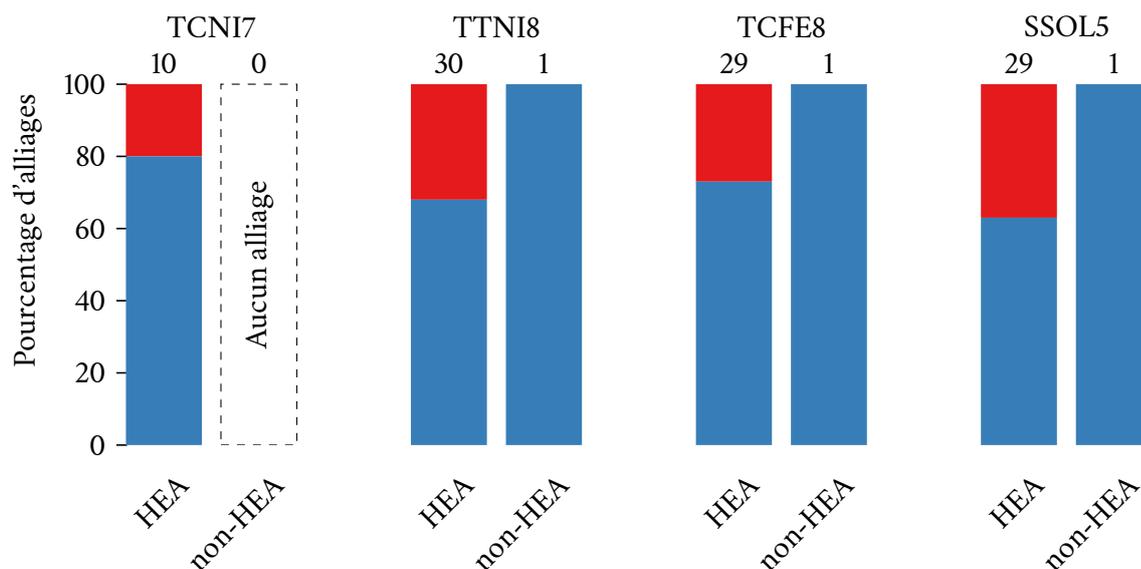


Figure 4.8 — Prédictions correctes (barres bleues) et incorrectes (barres rouges) de la formation d'un HEA ou d'un non-HEA pour les alliages de la base de données de Toda-Caraballo & Rivera-Díaz-del-Castillo²³² dont la probabilité P_F est supérieure à 0,59. Plus les barres bleues s'approchent de 100 % et plus la capacité prédictive de la base de données thermodynamiques est bonne. Le nombre d'alliages dans chaque catégorie est indiqué au sommet des barres.

Le critère $P_F \geq 0,6$ semble ainsi garantir l'adéquation des prédictions issues de CALPHAD et des paramètres physicochimiques détaillés précédemment.

La combinaison de nombreux critères permet donc d'atteindre de meilleures chances de prédire correctement le caractère HEA ou non-HEA d'un alliage. Cependant, ces résultats encourageants ne concernent que quelques centaines d'alliages dont seulement quelques dizaines de HEA ; ils sont ainsi susceptibles de s'avérer erronés, notamment de par le caractère probabiliste des critères P_I et P_F obtenus à l'aide de méthodes statistiques sur un nombre modéré d'alliages. Afin de minimiser le risque d'erreur, les critères P_I et P_F sont combinés *via* une multiplication ; le critère résultant P_{IF} représente la probabilité « totale » qu'un alliage soit HEA. Du point de vue de l'optimisation, l'association des critères P_I et P_F est raisonnable étant donné que ce ne sont pas deux objectifs antagonistes. Au contraire, ces critères sont « alliés », le recours à l'un ou l'autre devant permettre de faire tendre la composition des alliages optimaux vers celles d'alliages monophasés. Ainsi, l'optimisation indépendante de ces critères mènerait à l'obtention de compromis dénués de sens. De plus, cette combinaison rend l'optimisation plus « robuste » puisque moins sensible à une erreur d'un des deux critères.

Par définition, un seuil de 0,6 est ainsi considéré comme étant la valeur minimale des critères P_I et P_F pour qu'un alliage soit considéré HEA.

Dans la suite de ce travail, le critère de conception guidant l'optimisation de la composition d'alliages vers des domaines où ceux-ci sont susceptibles d'être monophasés est le critère P_{IF} :

$$P_{IF} = P_I \times P_F \quad (4.15)$$

Ce critère est à maximiser. De plus, un alliage est considéré à forte entropie si $P_I \geq 0,6$ et $P_F \geq 0,6$.

La définition scalaire de P_{IF} permet de guider graduellement l'algorithme d'optimisation qui, au

lieu de raisonner de manière binaire (HEA / non-HEA), gère des alliages ayant « plus ou moins » de chances d'être HEA. Avec les critères d'optimisation additionnels introduits dans les paragraphes suivants, cette « gradualité » résulte en un ensemble de compromis qui enrichit le processus de décision amenant au choix d'un alliage, en faisant prendre connaissance au preneur de décision des bénéfices et risques possiblement encourus sur la stabilité de la solution solide. La thermodynamique prédictive sera également mise à contribution lors du processus de sélection *via* la vérification *a posteriori* de la constitution des résultats issus des optimisations.

4.2.6 Autres critères de conception

Le critère P_{IF} permet de guider l'optimisation de la composition d'alliages de manière à maximiser les chances d'obtenir des constitutions monophasées. Néanmoins, le respect absolu de la définition d'un alliage à forte entropie n'est pas une fin en soi et doit être relativisé : en effet, le caractère homogène d'un alliage à plus de cinq éléments ne renseigne pas (complètement) sur ses caractéristiques macroscopiques, et ne garantit pas que les effets structuraux, cinétiques et « cocktails », tels que définis par Yeh *et al.*,⁴⁸ permettent d'atteindre des propriétés correctes et notamment compétitives vis-à-vis des alliages de fer, d'aluminium, de titane ou de nickel existants.

Afin de compléter le scalaire P_{IF} , deux autres critères de conception sont ainsi exploités : la masse volumique (ρ) et la contribution de la solution solide au renforcement (CSSR). Ceux-ci guident l'optimisation d'alliages potentiellement à forte entropie vers des compositions optimisant, en plus de la probabilité d'être monophasés, la résistance mécanique spécifique, c'est-à-dire rapportée à la masse volumique .

Identiquement aux superalliages, la minimisation de la masse volumique est cruciale pour préserver la praticité d'exploitation d'un alliage, en particulier dans le domaine aéronautique. La minimisation de la masse volumique pénalise notamment l'incorporation d'éléments denses telles les espèces réfractaires. La masse volumique est estimée grâce au modèle détaillé dans le travail de Toda-Caraballo & Rivera-Díaz-del-Castillo.²³²

La maximisation de la contribution de la solution solide au renforcement global de l'alliage impose à l'algorithme d'optimisation un impératif de performance allant de pair avec l'effet escompté de distorsion de la maille dans les alliages à forte entropie. Cette contribution est calculée en faisant usage du modèle introduit dans un autre travail de Toda-Caraballo & Rivera-Díaz-del-Castillo.²⁴⁰

4.3 Adaptation de l'algorithme génétique

L'optimisation de la composition de HEA est conduite de façon largement identique à celle des superalliages à base de nickel. Quelques modifications ont néanmoins été apportées à l'algorithme afin de l'adapter à des problèmes spécifiques aux alliages à forte entropie.

4.3.1 Utilisation d'une population initiale partiellement déterministe

L'espace des alliages à forte entropie potentiels est gigantesque : ces alliages peuvent être composés d'éléments parmi plusieurs dizaines de candidats dont les teneurs varient dans des gammes plus larges que dans le cas précédent des superalliages à base de nickel. La tâche d'exploration dévolue à l'algorithme génétique est donc difficile et il apparaît bénéfique d'exploiter les connaissances amassées jusqu'à maintenant sur les HEA pour l'aider à débiter l'exploration de l'espace. Une initialisation aléatoire de la population au démarrage de l'optimisation induit le risque d'une

recherche inefficace — cela a été constaté lors de la présente étude mais les résultats ne seront pas détaillés — car possiblement peu guidée par le critère P_{IF} , qui demeure le résultat d'une régression et dont l'exploitation dans des domaines excessivement éloignés de ceux qui ont servi à son calcul est incertaine. Bien que partielle, l'initialisation déterministe offre d'entrée de jeu à l'algorithme génétique une possibilité d'exploiter l'espace de recherche autour d'alliages à forte entropie avérés; l'algorithme peut ensuite chercher à diversifier les résultats à partir de ces alliages.

Au démarrage de toutes les optimisations, la moitié de la population est initialisée arbitrairement à partir d'alliages à forte entropie avérés et d'alliages dont certaines caractéristiques (δ , $\Delta\chi$, ΔH_{mix}) semblent *a priori* favorables au regard des cartes binaires de paramètres physicochimiques.²³² Parmi ces alliages se trouvent notamment des alliages équimolaires à cinq éléments ou plus, ainsi que des alliages à forte entropie de la base de données issue de la référence 232. L'autre moitié de la population initiale est constituée d'alliages générés aléatoirement.

Cette technique d'initialisation, dénommée « ensemencement » (*seeding*), semble être en mesure d'améliorer la performance d'une optimisation multiobjectifs en réduisant le nombre d'évaluations, c'est-à-dire le nombre de calculs des caractéristiques d'individus, pour obtenir des résultats identiques au cas où l'ensemencement n'est pas employé.²⁴¹ La liste des alliages servant à l'ensemencement est ici désignée « liste de graines » (*seeds*).

4.3.2 Régénération régulière de la population

L'algorithme génétique d'optimisation est similaire à celui utilisé précédemment dans le cas des superalliages à base de nickel. Cependant, la complexité du modèle en îlots n'a pas été reconduite dans le cadre des optimisations d'alliages à forte entropie afin d'alléger les charges de calculs; en effet, le modèle utilisé²³² est gourmand en ressources processeur. Une seule instance de ce modèle, écrit en langage `MATLAB` et relié à la routine d'optimisation en `C++` par l'intermédiaire du `MATLAB Engine`,¹⁴⁴ occupe en fonctionnement les huit cœurs du micro-ordinateur utilisé. Paralléliser plusieurs instances d'optimisation se ferait ainsi au détriment du temps d'optimisation. À la place, les résultats sont confirmés par la répétition de la même optimisation cinquante fois (les nombres pseudo-aléatoires utilisés aux différents niveaux et étapes de l'algorithme étant évidemment différents).

Dans la pratique, la réinjection d'individus conduite seulement entre une archive et une population locale s'est révélée efficace pour découvrir des alliages prometteurs (cf. sections suivantes). Dès lors, les éventuels bénéfices de la multiplication des instances d'optimisation ne semblent pas justifier le surcoût en temps de calcul.

La périodicité de la redistribution d'individus optimaux vers la population a également été modifiée. La population n'est plus régénérée périodiquement mais seulement lorsque le ratio d'amélioration relatif devient faible ou la proportion de doublons dans la population devient élevé.

4.3.2.1 Ratio d'amélioration

Le ratio d'amélioration, calculé à l'issue de chaque génération, sert à déterminer si le « potentiel » de la population est « épuisé » : un ratio d'amélioration faible signifie en effet que peu de nouveaux individus optimaux sont trouvés et remplacent des individus de l'archive, auquel cas il semble pertinent de faire repartir la population sur de nouvelles bases.

Dans la pratique, si le ratio d'amélioration relatif est inférieur à 0,1 % (c'est-à-dire si moins de 0,1 % de l'archive est remplacé à l'issue d'une génération), la population est réinitialisée : les doublons en sont supprimés (un exemplaire de chaque étant conservé) et une nouvelle population est remplie,

avec une probabilité égale, soit d'individus de la population dont ont été ôtés les doublons, soit d'individus de l'archive.

La population ainsi recrée continue son évolution selon la procédure NSGA-II standard.

4.3.2.2 Proportion de doublons

Dans les algorithmes génétiques élitistes tel NSGA-II, la proportion d'individus identiques dans la population (dans l'espace des gènes, c'est-à-dire des compositions) peut devenir élevée; c'est un exemple de déviation génétique. Ces doublons peuvent freiner la progression de l'exploration de l'espace des compositions en obligeant l'algorithme à générer un grand nombre d'individus dans leur voisinage. Afin de remédier à ce problème, la suppression régulière des doublons de la population a été suggérée dans la littérature.^{208,242}

Dans le présent travail, la proportion de doublons dans la population est contrôlée à chaque génération, le dépassement d'une valeur de 30 % entraînant la régénération de la population. Cette régénération consiste à ne garder qu'un exemplaire de chaque doublon et à compléter la population ainsi réduite soit par des individus provenant de la liste de graines, soit, à probabilité égale, d'individus aléatoirement générés. La procédure de génération aléatoire sera décrite dans la section suivante.

4.3.3 Aspect combinatoire

Le développement d'alliages à forte entropie est similaire à la conception de superalliages à base de nickel, et consiste en l'ajustement de la nature et de la teneur en éléments de manière à optimiser les critères de conception. Cependant, dans le cas des superalliages, l'optimisation ne portait que sur une unique famille d'alliages ayant pour base le nickel. La somme des additions maximales ne dépassait pas 100 % et le nickel, venant en complément, n'était ainsi inclus qu'implicitement dans l'optimisation.

En revanche, l'optimisation de la composition d'alliages à forte entropie est ici conduite simultanément sur plusieurs familles d'alliages, c'est-à-dire des alliages dont les éléments principaux varient parmi plus de dix espèces, sans qu'aucun élément ne soit systématiquement présent puisque les alliages à forte entropie ne possèdent par définition pas d'élément de base pouvant servir de « reste ». Cette absence, couplée au grand nombre d'éléments possibles, complique la gestion des individus.

Au sein de l'algorithme génétique, chaque alliage est représenté par un vecteur listant la teneur de tous les éléments possibles, présents ou pas dans l'alliage; en d'autres termes, certains éléments du vecteur sont nuls. Par définition, un HEA doit être composé d'au moins cinq éléments pouvant soit être présents et prendre des valeurs comprises entre 5 %_{at.} et 35 %_{at.}, soit être absents (0 %_{at.}); logiquement, le total de ces teneurs doit être égal à 100 %_{at.}. La gestion de la représentation génotypique des alliages au sein de l'algorithme génétique dans le respect de la définition des alliages à forte entropie présente ainsi trois difficultés; la représentation d'un alliage doit en effet reproduire les contraintes sus-citées et respecter :

1. le nombre minimal d'éléments d'alliage (cinq);
2. les teneurs autorisées (entre 5 %_{at.} et 35 %_{at.}, 0 %_{at.} sinon);
3. la somme totale des teneurs (100 %_{at.}).

Afin de respecter ces conditions, les individus générés aléatoirement au démarrage de l'optimisation sont créés comme suit :

1. la valeur de tous les gènes est mise à zéro;

2. tant que moins de cinq éléments sont présents (c'est-à-dire tant que moins de cinq éléments possèdent une concentration supérieure ou égale à 5 %_{at.}) :
 - a) l'écart entre la concentration totale en éléments d'alliage et 100 %_{at.} est calculé ;
 - b) tant que cet écart est supérieur à 5 %_{at.}, un élément à la concentration nulle est tiré au sort ; lui est affectée une concentration comprise entre 5 %_{at.} d'une part et le minimum entre l'écart de concentration et 35 %_{at.} d'autre part. L'écart de concentration est ensuite recalculé ;
 - c) si l'écart devient inférieur à 5 %_{at.} sans être nul, l'individu est modifié par l'opérateur de réparation détaillé ci-après (cf. [section 4.3.3](#)).

Les trois conditions de validité de la composition d'un alliage à forte entropie ont motivé le développement d'un opérateur de « réparation » destiné à corriger le génome d'alliages que les transformations génétiques peuvent amener à invalider — selon la définition d'un alliage à forte entropie, voire la définition même d'un alliage. Cet opérateur est appliqué à chaque individu à l'issue de l'opération de reproduction. En effet, l'opérateur SBX utilisé est conçu pour gérer des variables continues non contraintes et peut introduire des déviations par rapport aux bornes. Ces déviations entraînent un déséquilibre des teneurs en éléments dans l'alliage et conduisent parfois à un nombre d'éléments inférieur à cinq. L'opérateur de réparation corrige successivement le nombre d'éléments, leur teneur et le total des concentrations, selon les procédures suivantes.

Nombre d'éléments Si un alliage de la population contient moins de cinq éléments, alors des éléments lui sont aléatoirement attribués à hauteur de 5 %_{at.}. L'ajout des éléments se fait un par un et est répété tant que leur nombre est insuffisant.

Bornes des teneurs Si la teneur (non nulle) en certains éléments d'alliage est amenée à varier en dehors des bornes des HEA (au-delà de 35 %_{at.} ou en deçà de 5 %_{at.}), alors celle-ci est ramenée à la borne la plus proche :

- une teneur supérieure à 35 %_{at.} est ramenée à 35 %_{at.} ;
- une teneur inférieure à 5 %_{at.} mais supérieure ou égale à 3 %_{at.} est amenée à 5 %_{at.} ;
- une teneur inférieure à 3 %_{at.} est ramenée à zéro.

Somme des teneurs Si, après correction du nombre d'éléments et de leur proportion, la somme des concentrations totales est différente de 100 %_{at.}, alors l'écart à 100, d , est calculé :

$$d = 100 \times \left(1 - \sum_{i=1}^n x_i \right) \quad (4.16)$$

n étant le nombre d'éléments et x_i la fraction atomique de l'élément i .

Deux cas de figure sont alors possibles :

- la différence d est négative : il y a un « surplus » de matière;
- la différence d est positive : il y a un « manque » de matière.

Ces surplus ou manques sont répartis de manière itérative sur les différents éléments dont la teneur est non nulle et supérieure à 5 %_{at.}, en commençant par les plus élevées de manière à minimiser leur modification relative. La procédure est illustrée dans le [tableau 4.1](#), où un individu présentant un nombre initialement insuffisant d'éléments et un surplus est réparé ([figure 4.9](#)). Cet individu sert ensuite de parent — en se reproduisant avec un autre individu non représenté ici — à un individu ne respectant pas non plus les contraintes de composition, et qui est à son tour réparé.

TABLEAU 4.1 — Illustration de la routine de réparation employée pour corriger les individus ne respectant pas les critères de composition des alliages à forte entropie. Dans cet exemple, les alliages peuvent être constitués d'un nombre $n \leq 6$ éléments dont la somme des pourcentages est égale à Σ ; $d = 100 - \Sigma$ est l'écart de teneurs à corriger.

Al	Co	Cr	Fe	Mn	Ni	Σ	d	n		
30	—	20	15	—	43	108	-8	4	⚠	Nombre d'éléments trop faible; Ni trop élevé; $\Sigma \neq 100$
30	—	20	15	5	43	113	-13	5	🔧	Ajout de 5 % _{at.} au Mn, sélectionné aléatoirement
30	—	20	15	5	35	105	-5	5	🔧	Diminution du Ni à 35 % _{at.}
30	—	20	15	5	34	104	-4	5	🔧	Diminution itérative (surplus de 4) commençant par le Ni
29	—	20	15	5	34	103	-3	5	⚠	$d \neq 0 \Rightarrow$ 🔧 Diminution itérative : Al
29	—	19	15	5	34	102	-2	5	⚠	$d \neq 0 \Rightarrow$ 🔧 Diminution itérative : Cr
29	—	19	14	5	34	101	-1	5	⚠	$d \neq 0 \Rightarrow$ 🔧 Diminution itérative : Fe
29	—	19	14	5	33	100	—	5	⚠	$d \neq 0 \Rightarrow$ 🔧 Diminution itérative : Ni (car Mn $\not\geq$ 5 % _{at.})
27	3	19	14	1	34	98	2	6	⚠	Après reproduction : Co, Mn < 5 % _{at.} et $\Sigma \neq 100$
27	5	19	14	—	34	99	1	5	🔧	Augmentation du Co à 5 % _{at.} , diminution du Mn à 0 % _{at.}
27	5	19	14	—	35	100	—	5	🔧	Augmentation itérative (manque de 1) du Ni

Cette manière de procéder induit un biais : les éléments prépondérants sont en effet toujours les premiers à subir la diminution ou l'augmentation des concentrations. Dans le cas où les surplus et manques sont faibles, ce biais a une influence limitée : le renforcement de la prépondérance de certains éléments ne se fait qu'à hauteur de quelques pourcents atomiques, ce qui ne change pas drastiquement l'alliage ([figure 4.9](#)). Ainsi, cette réparation n'entrave pas significativement les capacités d'exploitation et d'exploration de l'algorithme conférées notamment par l'opérateur de reproduction; le transfert d'une partie des gènes des parents aux enfants, même s'il remet en cause leur validité, conserve sa « signification ». Par exemple, pour un enfant issu de la reproduction ayant reçu d'un de ses parents un gène de 37 %_{at.}, l'opérateur de réparation ramènerait la valeur de ce gène de 37 %_{at.} à 35 %_{at.}; cette altération est marginale, l'enfant conservant un trait proche d'un de ses parents. Les variations des teneurs imposées par l'opérateur de réparation étant relativement faibles, elles n'entraînent qu'une altération limitée des propriétés.

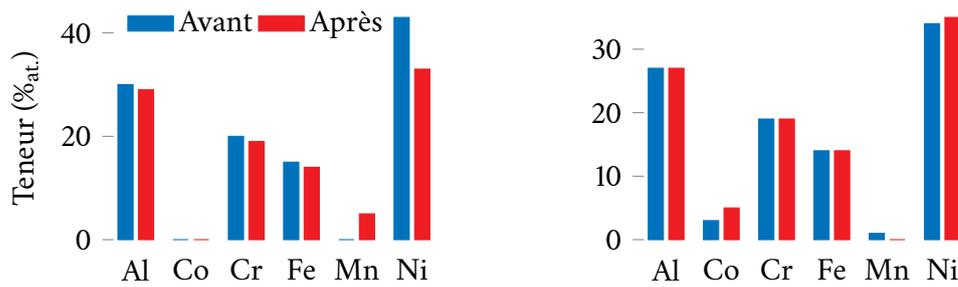


Figure 4.9 — Illustration graphique de l'effet des réparations détaillées dans le [tableau 4.1](#). À gauche sur le premier individu ; à droite sur l'enfant virtuellement généré.

À l'inverse, le croisement d'alliages de deux familles complètement différentes (par exemple des familles Al-Co-Cr-Fe-Mn et Mo-Ta-Ti-V-Zr) impose un biais plus prononcé. En effet, il peut résulter de ce croisement des alliages susceptibles de contenir un grand nombre d'éléments en forte concentration (à l'extrême, un enfant Al-Co-Cr-Fe-Mn-Mo-Ta-Ti-V-Zr « équimolaire », c'est-à-dire avec 20 %_{at.} de chaque élément, ce qui ferait $\sigma = 200$ %_{at.}). Le surplus à répartir est alors plus élevé que dans le cas précédent et la correction des teneurs implique une modification nette des propriétés. Néanmoins, ce croisement conserve également sa « signification » puisqu'il conduit effectivement à la génération d'une famille hybride.

4.3.4 Opérateur de mutation

L'opérateur de mutation a été modifié par rapport aux optimisations précédentes de manière à ne pas produire d'individus ne respectant pas la définition d'un HEA. La mutation sur un individu est ainsi opérée en intervertissant la valeur de deux gènes de l'individu à la condition qu'au moins l'une des deux soit non nulle.

4.3.5 Injection de cas

La liste de graines est également exploitée pour introduire de la diversité dans la population. Une partie des individus sélectionnés pour mutation est entièrement remplacée par des alliages de cette liste. La probabilité de remplacement est égale à celle de mutation. La sélection des alliages introduits est aléatoire car la taille de la liste est supérieure à celle de la population. L'introduction de ces alliages permet l'orientation de la recherche vers des espaces possiblement inexplorés jusqu'à et donc le « déblocage » de la recherche dans le cas où celle-ci est « tombée » dans un minimum local (ou « bassin d'attraction »). De plus, les alliages de la liste ayant été « préoptimisés » vis-à-vis de certains paramètres physicochimiques, ils sont susceptibles d'être de bons parents, c'est-à-dire de bons points de départ vers une optimisation plus poussée. L'injection de ces solutions préoptimisées (*case injection*) est donc bénéfique puisqu'elle raccourcit la recherche en l'orientant vers des individus proches des alliages introduits qui sont supposés bons.²⁴³ L'introduction d'individus « nouveaux » (non-générés par l'algorithme génétique) est une méthode ayant été précédemment décrite par Hornby²⁴⁴ comme permettant de « s'échapper du bassin d'attraction de la population de départ » et comme une alternative au « redémarrage de zéro » induit par l'introduction d'alliages aléatoirement générés.

L'adaptation de l'opérateur de mutation et l'introduction d'alliages préoptimisés provoquent des modifications « agressives » du génotype ayant pour but de relancer l'exploration ; dans le premier cas, l'alliage peut complètement changer de famille *via* l'échange d'un gène non-nul et d'un gène nul ; dans le second cas, la variation de l'alliage est totale.

4.3.6 Autres paramètres de l'algorithme génétique

Le paramètre η_c de l'opérateur de reproduction SBX a été déterminé en fonction de l'adéquation, observée expérimentalement, entre parents et enfants. En particulier, il a été choisi de manière à minimiser la proportion d'individus rendus incompatibles avec la définition d'un HEA, tout en permettant aux gènes « d'enjamber » le pas de 1 %_{at.}. En effet, l'opérateur SBX conduit les calculs de reproduction sur des valeurs réelles qui sont ensuite arrondies à l'entier le plus proche; il faut ainsi que la variation de la valeur d'un gène soit supérieure à 0,5 %_{at.} par rapport à la valeur initiale pour être significative.

Le nombre de générations maximal a été abaissé à 500; en effet, dans les optimisations de la composition de superalliages, le ratio d'amélioration indiquait un ralentissement de l'optimisation (un nombre plus faible d'individus non-dominés trouvés) après seulement 200, 300 voire 400 générations.

Tous les autres paramètres de l'algorithme génétique n'ayant pas été mentionnés dans les sections précédentes sont identiques à ceux utilisés dans le cadre des optimisations de la composition de superalliages à base de nickel; à savoir :

- taille de la population : 500;
- probabilité de reproduction : 0,7;
- probabilité de mutation : 0,1.

4.4 Optimisation d'alliages à forte entropie

4.4.1 Espace de recherche

Dans un premier temps, une optimisation est conduite vis-à-vis des critères précédemment détaillés. Celle-ci concerne les seize éléments suivants, qui sont présents dans trois des quatre bases de données thermodynamiques utilisées pour la vérification des critères de conception :

Al, Co, Cr, Cu, Fe, Hf, Mn, Mo, Nb, Ni, Ru, Ta, Ti, V, W, Zr

Chaque élément peut prendre des valeurs comprises dans le domaine :

$$\{0\} \cup \llbracket 5, 35 \rrbracket$$

Au cours de l'optimisation, ces valeurs varient par pas de 1 %_{at.}; chaque élément dispose donc de 32 niveaux possibles. Ce pas est préférable au pas de 0,1 %_{at.} précédemment utilisé. En effet, étant donné le caractère exploratoire de l'optimisation, une précision de 0,1 %_{at.} semble induire plus d'inconvénients que d'intérêts, rendant l'optimisation trop ambitieuse en démultipliant le nombre de combinaisons à tester. La thermodynamique prédictive sera utilisée *a posteriori* en guise de vérification des alliages optimisés.

4.4.2 Objectifs

L'optimisation de la composition d'alliages est conduite sur les critères précédemment décrits :

- maximisation du critère P_{IF} ;
- maximisation de la contribution de la solution solide au renforcement;
- minimisation de la masse volumique.

4.4.3 Résultats

L'optimisation, répétée cinquante fois de manière à s'assurer de la reproductibilité des résultats, a nécessité une centaine d'heures de calculs pendant lesquelles environ huit millions d'alliages ont été évalués. La [figure 4.10](#) présente l'évolution du ratio d'amélioration relatif pour dix des optimisations; celle-ci est similaire quelle que soit l'optimisation, et tend à indiquer la convergence. En effet, de façon identique aux optimisations sur les superalliages, il devient de plus en plus difficile pour l'algorithme de trouver après quelques centaines de générations un nombre significatif d'individus surpassant les alliages optimaux de l'archive.

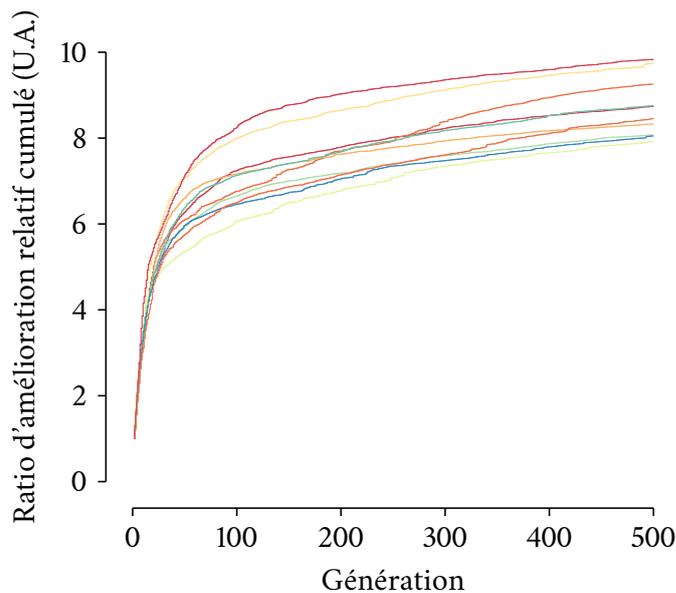


Figure 4.10 — Ratio d'amélioration relatif cumulé en fonction de la génération, représenté pour dix des cinquante optimisations identiques (une par couleur).

À l'issue des cinquante optimisations, les alliages contenus dans chaque archive individuelle sont regroupés dans une seule archive; un tri de non-dominance permet de n'y conserver que les alliages Pareto-optimaux. La [figure 4.11](#) présente l'ensemble de Pareto au centre; il est composé des 3155 individus de l'archive globale. La contribution de la solution solide au renforcement est représentée en fonction de la masse volumique tandis que la couleur symbolise le critère P_{IF} . Les éléments de l'archive vérifiant ce dernier critère ne présentent par définition que des valeurs P_{IF} minimales de 0,36 ($P_{IF} = P_I P_F$ avec $P_I \geq 0,6$ et $P_F \geq 0,6$).

Adossés à chaque axe du graphe central de la [figure 4.11](#) se trouvent des histogrammes montrant la répartition des alliages optimaux dans l'espace des objectifs : de gauche à droite pour la CSSR, la masse volumique et le critère P_{IF} . Le nombre juxtaposé à chaque barre correspond au nombre d'alliages d'une classe.

L'allure de l'ensemble de Pareto confirme que la conception d'alliages à forte entropie est une affaire de compromis : en effet, les alliages prédits comme étant les plus résistants (c'est-à-dire dont la CSSR est la plus élevée) possèdent généralement les valeurs les plus faibles du critère P_{IF} , c'est-à-dire le moins de chance d'être constitués d'une seule solution solide. Cette relation inverse indique que la maximisation du renforcement par solution solide conduit à des alliages dont l'homogénéité de la constitution serait plus difficile à assurer; autrement dit, la solution solide serait, selon les critères physicochimiques utilisés, moins stable que dans le cas des alliages de plus faibles CSSR. Cette incompatibilité revêt un sens physique : en effet, l'obtention d'un fort renforcement

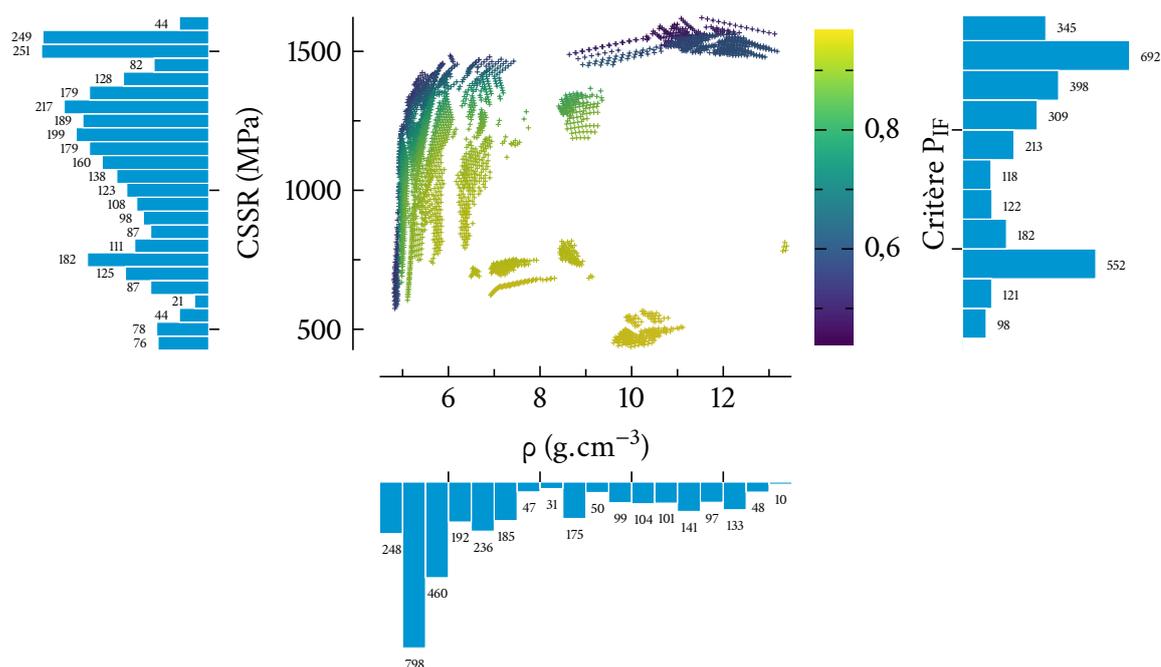


Figure 4.11 — Résultats de l'optimisation. La figure du centre représente l'ensemble de Pareto tridimensionnel : la contribution de la solution solide au renforcement (CSSR) est tracée en fonction de la masse volumique ; en couleur est symbolisé le critère P_{IF} . Les histogrammes présentent la répartition des alliages optimaux selon les trois objectifs, suivant l'axe auquel ils sont adossés (de gauche à droite : CSSR, masse volumique, critère P_{IF}). À chaque barre correspond un nombre d'alliages.

par solution solide nécessite l'introduction de grandes distorsions dans le réseau ; de telles distorsions ont tendance à s'opposer à la formation d'une solution solide. L'existence de tels objectifs antagonistes justifie ainsi le recours à l'optimisation multiobjectifs pour découvrir les meilleurs compromis possibles.

L'étendue des caractéristiques des alliages optimaux est grande : masse volumique, CSSR et P_{IF} varient quasiment du simple au triple. La répartition sur ces espaces est inégale avec, néanmoins, plusieurs dizaines d'alliages au minimum par classe de caractéristiques. Tout l'espace n'est cependant pas couvert, les alliages étant organisés de façon disparate dans une dizaine « d'îlots ». Les valeurs de CSSR et de P_{IF} sont variées en deçà de $7 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$; au-delà de cette masse volumique, il existe peu d'alliages dont la CSSR est comprise entre 600 et 1400 MPa.

La gamme de composition des alliages optimaux est également diverse : la [figure 4.12](#) montre la distribution de leurs éléments. Les teneurs nulles ne sont pas affichées.

Quelques observations peuvent être formulées :

- nickel, cuivre et ruthénium ne sont pas du tout présents, même à la teneur minimale de 5 %_{at} ;
- le cobalt n'est présent que dans 0,2 % des alliages optimaux à hauteur de 5 %_{at} ;
- la teneur d'hafnium est limitée à 5 %_{at} et concerne seulement 2 % des alliages ;
- peu d'alliages contiennent plus de 10 %_{at} de fer ;
- les concentrations en manganèse et en niobium restent principalement dans la gamme 5-10 %_{at}, bien que des teneurs de 20 %_{at} soient possibles ;

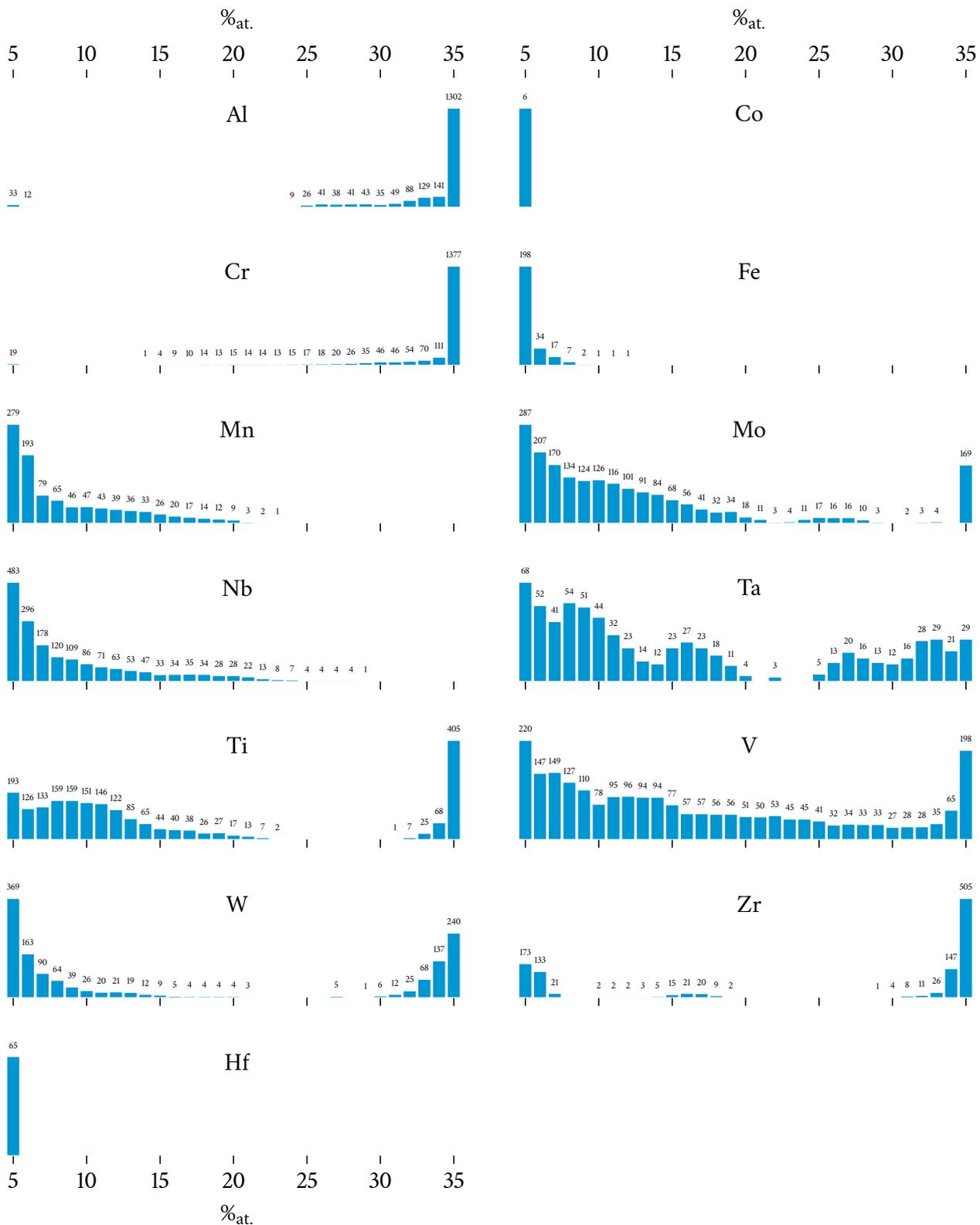


Figure 4.12 — Répartition des éléments dans les alliages optimaux. Seules les teneurs supérieures à zéro sont montrées. À chaque barre correspond un nombre d'alliages comportant la teneur indiquée en abscisse.

- le molybdène suit une tendance proche de celle du niobium mais est généralement présent en plus grande quantité et est employé sur toute sa gamme, en particulier à 35 %_{at.} dans 5 % des alliages;
- le recours au tantale est moindre que celui au molybdène mais couvre quasiment toute la gamme possible;
- la distribution de la teneur en titane est quelque peu similaire à celle du molybdène; le titane est cependant utilisé à plus de 31 %_{at.} dans 16 % des alliages;
- le tungstène est majoritairement employé entre 5 et 10 %_{at.} et entre 30 et 35 %_{at.};
- l'usage du zirconium se cantonne à deux gammes : 5-7 %_{at.} (10 % des alliages optimaux) et 33-35 %_{at.} (21 %);
- l'aluminium et le chrome sont très largement utilisés à hauteur de 35 %_{at.} dans plus de 40 % des alliages optimaux;
- chaque teneur possible en vanadium est présente dans au moins 1 % des alliages.

La [figure 4.12](#) montre également que la répartition des éléments se fait majoritairement aux extrêmes de la gamme de composition possible et non au centre comme les alliages équimolaires. Cette tendance à s'éloigner des compositions équimolaires peut être illustrée en introduisant un indicateur d'écart moyen à la composition équimolaire. Cet écart est défini pour chaque alliage comme étant la moyenne des différences absolues entre la concentration de chaque élément x_i dont la teneur est supérieure à 5 %_{at.} et de la concentration équimolaire $100/n$, avec n le nombre d'éléments présents dans l'alliage :

$$\text{écart} = \frac{1}{n} \sum_{i=1, x_i \geq 5}^n \left| x_i - \frac{100}{n} \right| \quad (4.17)$$

La [figure 4.13](#) présente le nombre d'alliages optimaux par tranche d'écart moyen à la composition équimolaire.

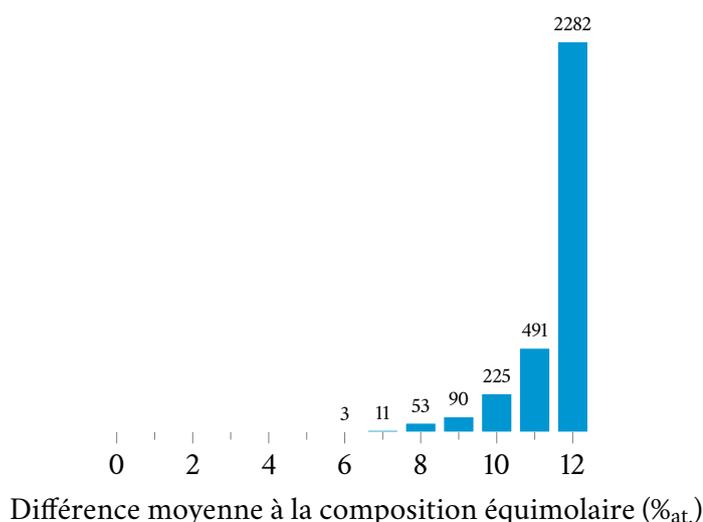


Figure 4.13 — Nombre d'alliages optimaux par tranche d'écart moyen à la composition équimolaire.

La [figure 4.13](#) met en évidence qu'aucun alliage optimal n'est équimolaire; au contraire, environ 90 % d'entre eux présentent un écart moyen de plus de 10 %_{at.} par rapport à la composition équimolaire.

Au total, 59 familles sont représentées dans les résultats alors que l'espace exploré contient potentiellement 63 019 familles différentes. Parmi ces 59 familles, 38 contiennent cinq éléments (pour un total de 2398 alliages), vingt contiennent six éléments (755 alliages) et seulement une est composée de sept éléments (2 alliages AlCrMoNbTiVZr). Les dix principales familles (par fréquence) sont listées dans le [tableau 4.2](#). Ces dix familles regroupent 60 % des alliages optimaux. Il est à noter que la structure cristalline prédite pour l'ensemble des alliages optimaux est une structure Cubique Centrée (CC); cette prédiction s'appuie sur les valeurs de VEC et e/a .²³² Cette particularité sera commentée ultérieurement.

TABLEAU 4.2 — Les dix familles d'alliages optimaux les plus représentées; le nombre d'alliages par famille est indiqué à droite.

Famille	Nombre d'alliages
Al - Cr - Mn - Ti - V	414
Mo - Ta - Ti - W - Zr	237
Al - Cr - Mo - Nb - V	230
Mo - Nb - Ti - W - Zr	169
Al - Cr - Mn - Nb - V	163
Mo - Nb - Ta - Ti - V - W	156
Al - Cr - Mo - V - W	148
Mo - Nb - Ti - V - W Zr	143
Al - Cr - Fe - Mn - V	107
Mo - Ta - Ti - V - Zr	103

La [figure 4.14](#) illustre la répartition des éléments dans l'espace des objectifs. En haut à droite est reproduit l'ensemble de Pareto tridimensionnel ([figure 4.11](#)). Les treize autres graphes reprennent cette représentation en remplaçant le code couleur du critère P_{IF} par celui de la teneur en éléments d'alliage, qui est à rapporter à l'échelle du bas de la figure.

La [figure 4.14](#) met en évidence l'origine de la disparité de l'ensemble de Pareto, qui semble provenir de la répartition des éléments en plusieurs familles d'alliages différentes. Par exemple, l'aluminium, le chrome et le manganèse sont majoritaires aux faibles masses volumiques; le tungstène, le molybdène et le zirconium occupent surtout les parties où sont localisés les alliages les plus denses et les plus résistants; le tantale, le titane, le vanadium et, en proportion plus faible, le niobium et le molybdène, entrent plutôt dans la composition d'alliages de masse volumique intermédiaire mais de faible CSSR.

4.4.4 Confrontation des résultats avec la thermodynamique prédictive

Les alliages optimaux ont été trouvés sans assistance de la thermodynamique prédictive afin d'éviter des temps de calcul rédhibitoires. Il semble malgré tout pertinent de tester les alliages issus des optimisations à l'aide de la thermodynamique prédictive, afin de limiter au maximum le risque de concevoir des alliages ne formant pas une solution solide unique.

À cette fin, l'équilibre thermodynamique des alliages optimaux (dont les valeurs de P_I et de P_F sont supérieures à 0,6) a été calculé à des températures comprises entre 700 et 1300 °C, et leur caractère monphasé contrôlé. Cette gamme comprend des températures de traitements thermiques d'homogénéisation aisément « accessibles », en considérant d'une part qu'un traitement au-dessus de 1300 °C serait en pratique assez difficile à réaliser, et en supposant d'autre part que si une température inférieure à 700 °C permettait d'homogénéiser une solution solide un tel traitement devrait avoir une durée prohibitive. Ces calculs ont été effectués par pas de 50 °C; il existe donc treize

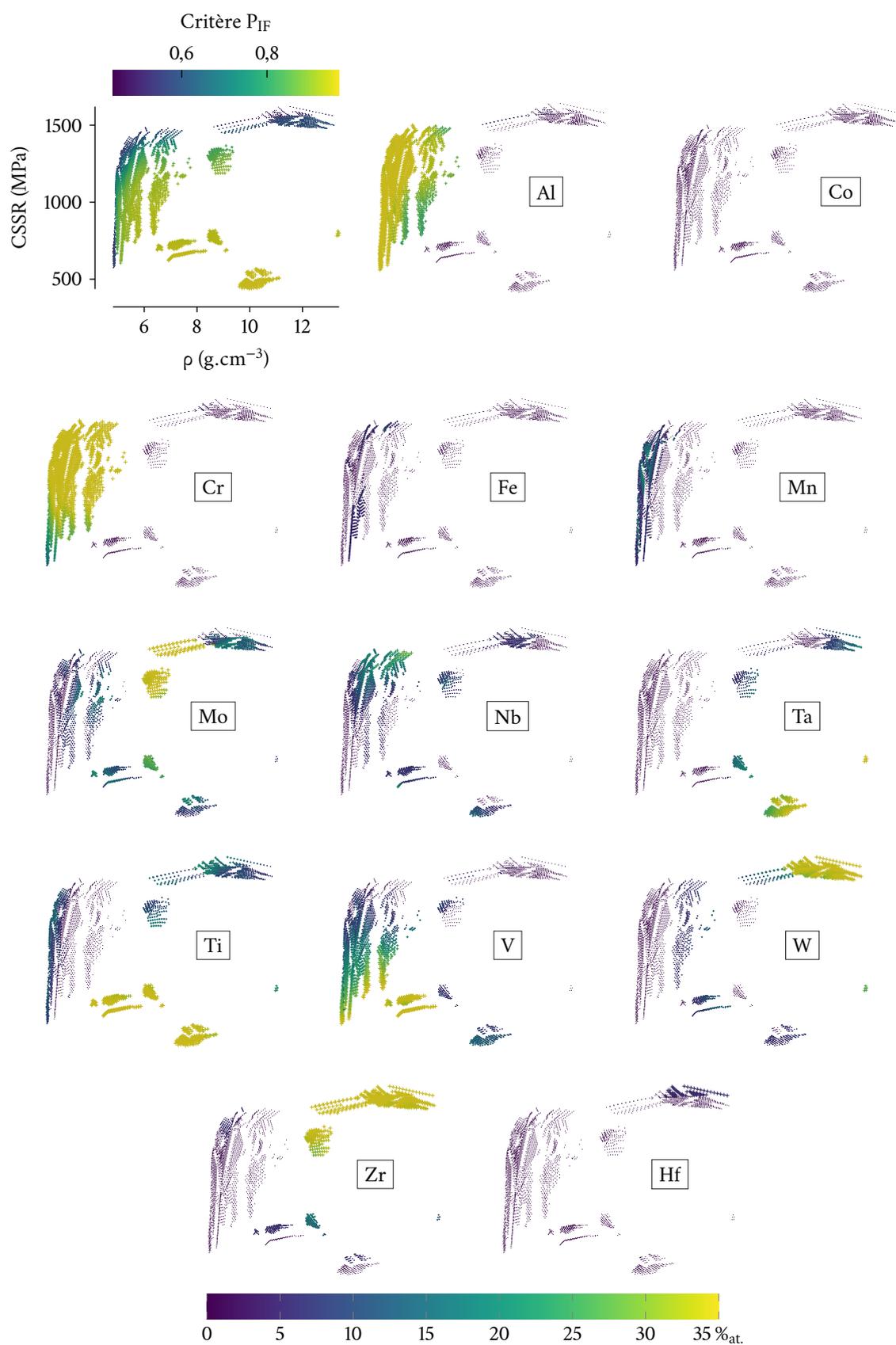


Figure 4.14 — Répartition des teneurs en éléments dans l'espace des objectifs. Chaque graphe représente l'ensemble de Pareto de la figure 4.11 (reproduit en haut à gauche); la couleur indique la proportion de l'élément indiqué en encart (échelle du bas).

températures auxquelles la constitution des alliages peut être contrôlée. Pour chaque alliage, le nombre de températures auxquelles une seule solution solide est prédite est déterminé ; la largeur de cette « plage de stabilité » de la solution solide est ensuite confrontée à la valeur du critère P_{IF} . Cette procédure est répétée pour chaque base de données thermodynamiques : TCNI7, TTNI8, TCFE8 et SSOL5. Toutes ces bases ne contiennent pas la totalité des éléments utilisés lors de l'optimisation ; les calculs sont donc effectués seulement sur les alliages à la composition adaptée.

La figure 4.15 présente les résultats de ces calculs avec la base de données TCNI7. Chaque barre est composée du pourcentage d'alliages dont le nombre de températures auxquelles une solution solide existe est nul ou compris dans les intervalles $[1; 5]$, $[6; 10]$ ou $[11; 13]$, le tout pour un intervalle de valeurs de P_{IF} défini en abscisse. À noter qu'il n'existe pas d'alliage possédant une valeur de P_{IF} comprise entre 0,36 et 0,4.

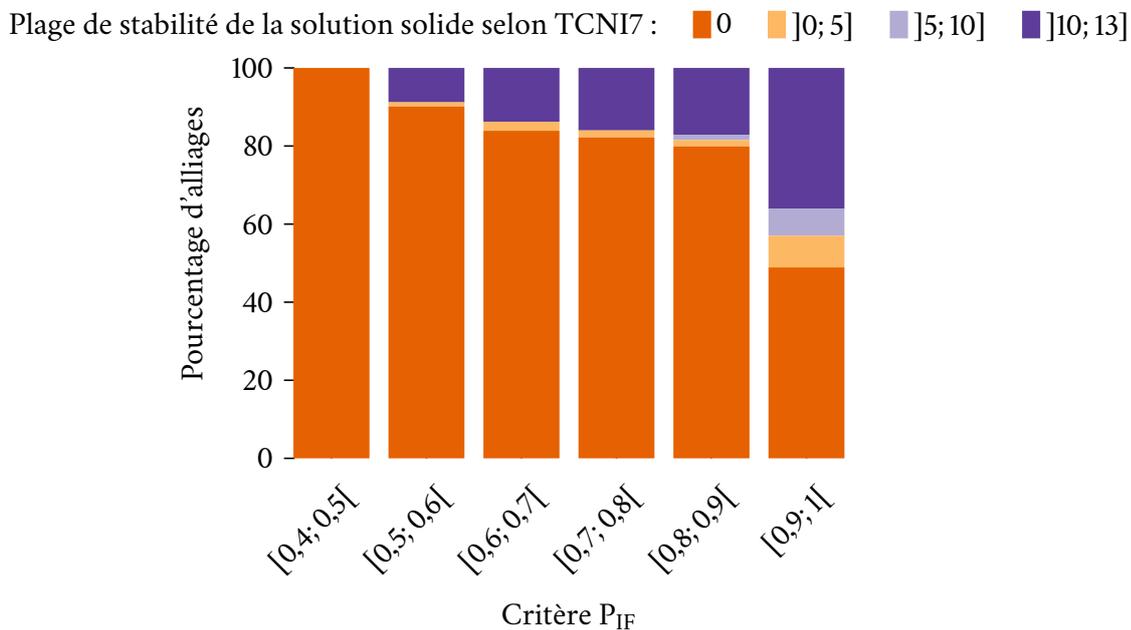


Figure 4.15 — Pourcentage d'alliages dont la plage de stabilité de la solution solide est comprise, selon TCNI7, entre 0 et 13 en fonction de la valeur de leur critère P_{IF} . Une plage égale à x ($x > 0$) signifie que la solution solide est l'unique phase prédite par TCNI7 sur un nombre de températures égal à $(x - 1) \times 50$ °C entre 700 et 1300 °C. Au maximum, pour $x = 13$, la plage s'étend de 700 à 1300 °C. Idéalement, le pourcentage d'alliages dans la plage $[10; 13]$ devrait augmenter avec le critère P_{IF} . Ne sont représentés sur l'histogramme que les alliages vérifiant le critère P_{IF} ($P_I \geq 0,6$ et $P_F \geq 0,6$).

Selon TCNI7, une grande partie des alliages optimaux n'est monophasée à aucune température entre 700 et 1300 °C, quelle que soit la valeur du critère P_{IF} . Néanmoins, lorsque celui-ci est faible, les prédictions thermodynamiques écartent tous les alliages. Le taux d'alliages prédits monophasés à aucune température est aussi le plus faible pour $P_{IF} > 0,9$; autrement dit, les tendances des prédictions de TCNI7 semblent s'accorder avec le critère P_{IF} . Cette constatation est cependant à rapprocher de l'importante proportion d'individus également prédits non-HEA à des valeurs de P_{IF} comprises entre 0,5 et 0,9, c'est-à-dire dans le cas d'alliages respectant le critère. Les prédictions basées sur TCNI7 divergent ainsi sensiblement du critère de conception P_{IF} .

Les résultats des calculs thermodynamiques avec TTNI8 sont présentés sur la figure 4.16. Ces résultats tranchent avec les précédents; en effet, la majeure partie des alliages optimaux est prédite monophasée à plus de dix températures entre 700 et 1300 °C.

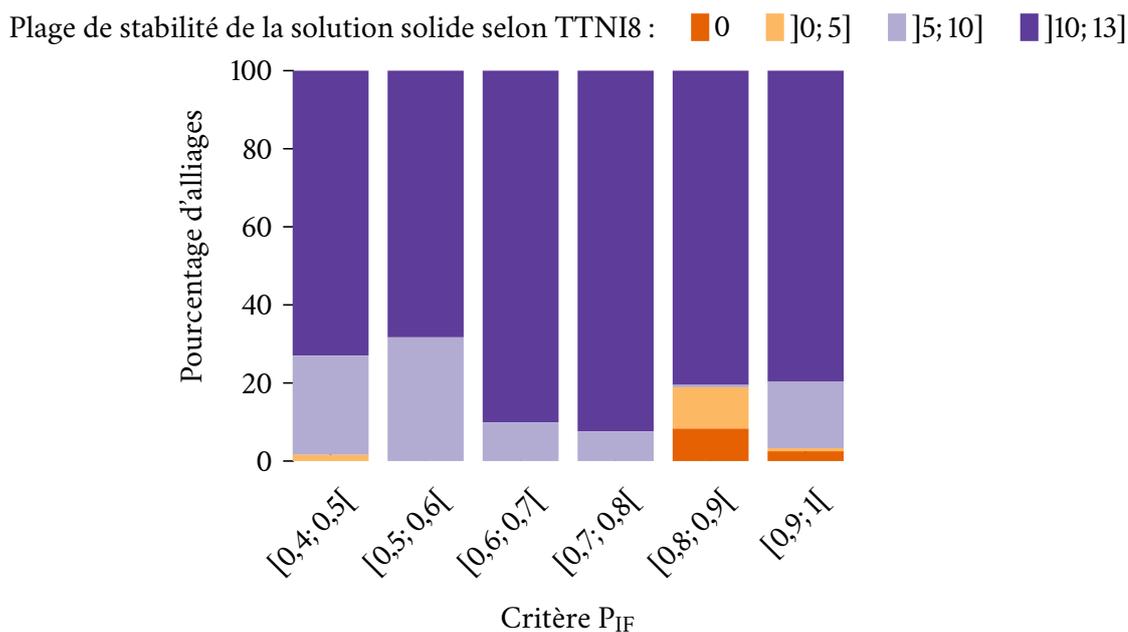


Figure 4.16 — Pourcentage d'alliages dont la plage de stabilité de la solution solide est comprise, selon TTNI8, entre 0 et 13 en fonction de la valeur de leur critère P_{IF} .

Les calculs basés sur TCFE8 produisent des résultats intermédiaires comparés aux précédents (figure 4.17). La proportion de non-HEA, maximale pour $P_{IF} \in [0,4; 0,5[$, diminue avec l'augmentation de P_{IF} . Une fois le critère P_{IF} supérieur à 0,8, les alliages optimaux sont quasiment tous prédits HEA à au moins six températures entre 700 et 1300 °C.

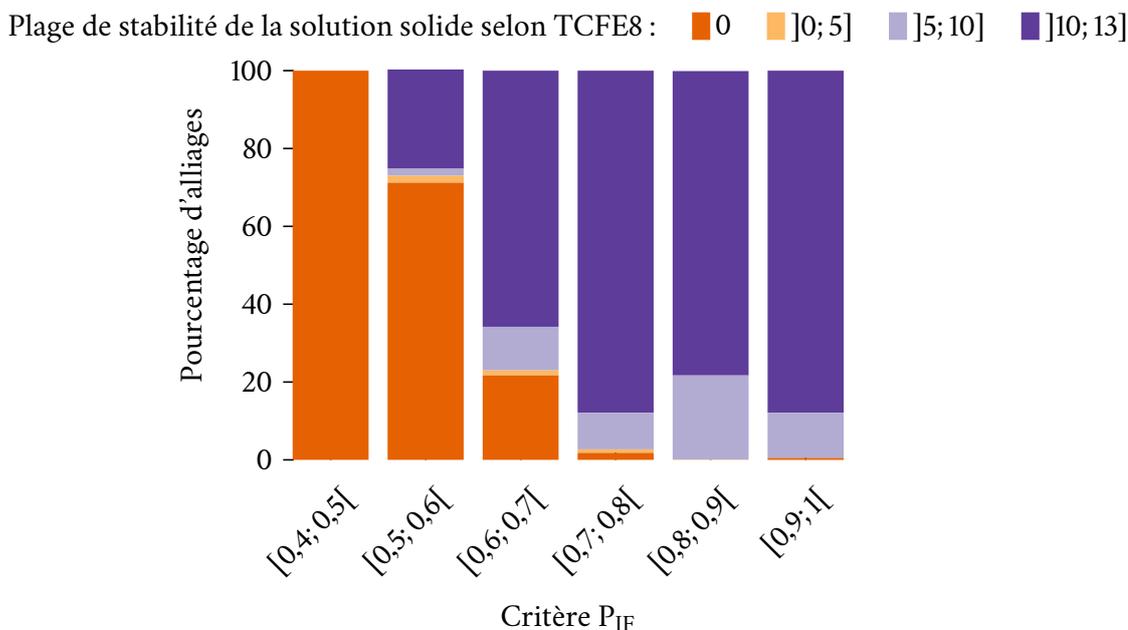


Figure 4.17 — Pourcentage d'alliages dont la plage de stabilité de la solution solide est comprise, selon TCFE8, entre 0 et 13 en fonction de la valeur de leur critère P_{IF} .

L'évolution de la largeur de la plage de stabilité de la solution solide est moins tranchée si les prédictions proviennent de la base SSOL5 (figure 4.18) : la proportion d'alliages prédits non-HEA est faible aux valeurs extrêmes de P_{IF} et présente un pic pour $P_{IF} \in [0,5; 0,6[$.

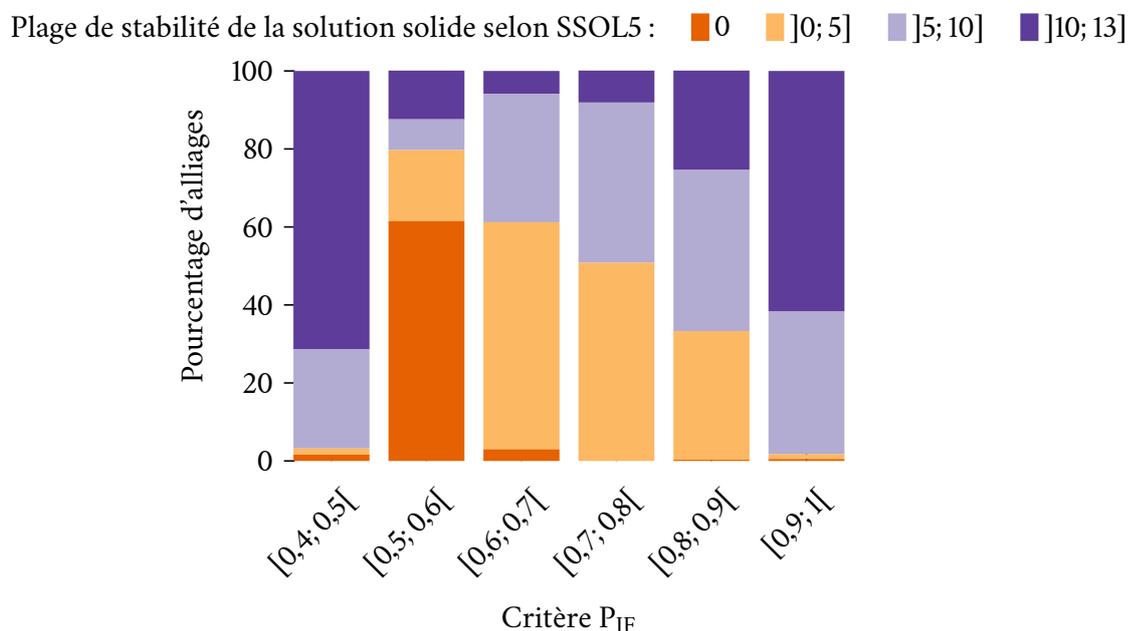


Figure 4.18 — Pourcentage d'alliages dont la plage de stabilité de la solution solide est comprise, selon SSOL5, entre 0 et 13 en fonction de la valeur de leur critère P_{IF} .

La base de données thermodynamiques TCNI7 semble donc être la plus « pessimiste » quant à l'obtention d'une solution solide pour une valeur du critère P_{IF} élevée. Elle est suivie des bases TCFE8, SSOL5 et TTNI8 (figure 4.19).

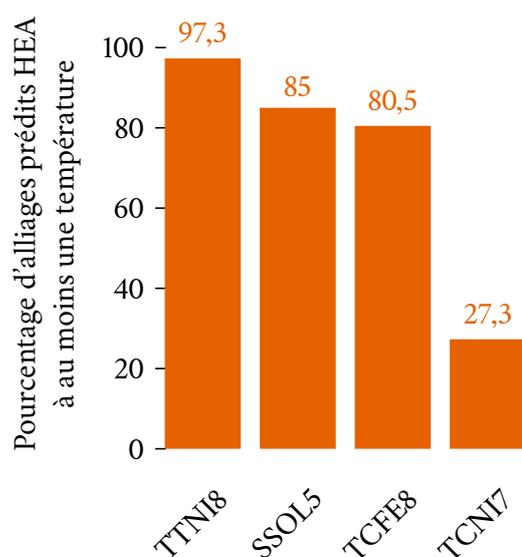


Figure 4.19 — Pourcentage d'alliages optimaux (dont le critère P_{IF} est respecté) prédits HEA à au moins une température selon la base de données thermodynamiques employée.

Globalement, sans entrer dans les détails des estimations de la thermodynamique prédictive, le critère P_{IF} a permis, indépendamment de cette dernière, la conception d’alliages tous prédits monophasés à au moins une température par au moins une base de données thermodynamiques (figure 4.20).

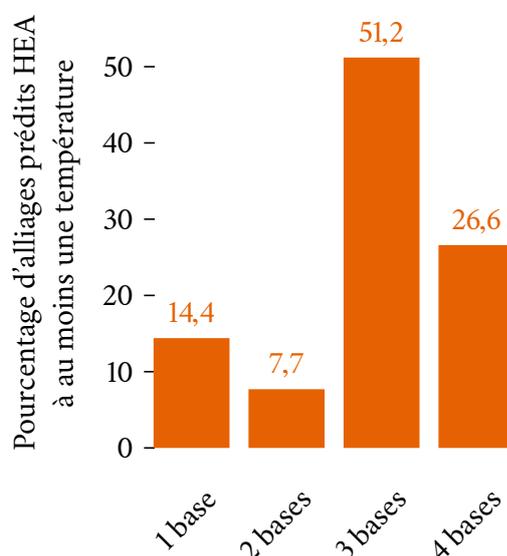


Figure 4.20 — Pourcentage d’alliages optimaux (dont le critère P_{IF} est respecté) prédits HEA à au moins une température par une, deux, trois ou l’ensemble des bases de données thermodynamiques.

4.4.5 Sélection d’alliages pour fabrication

Quatre alliages ont été sélectionnés pour fabrication parmi les 3155 alliages optimaux. Cette sélection a été opérée en considérant les deux critères d’optimisation « physiques » (la masse volumique ρ et la contribution de la solution solide au renforcement CSSR), ainsi que le critère P_{IF} et la thermodynamique prédictive. Plus précisément, deux critères de sélection ont été établis :

- la CSSR maximale;
- le ratio $CSSR/\rho$ maximal.

Pour chacun de ces deux cas, le critère P_{IF} et les résultats des calculs de la thermodynamique prédictive fournissent une estimation de la propension d’un alliage à être effectivement monophasé. Cette estimation quantifie le « risque » qu’en pratique un alliage sélectionné s’avère ne pas respecter la définition des alliages à forte entropie. La sélection a ainsi été opérée sans assistance de PROMETHEE : en effet, une fois les niveaux de risque définis, la sélection est ramenée à un problème bicritères (qui concerne seulement les propriétés physiques) plus facilement soluble par l’esprit humain, voire à un seul critère dans le cas du ratio $CSSR/\rho$ ou de la seule CSSR.

Les alliages choisis sont, par niveau de risque approximativement décroissant (tableau 4.3) :

- le HEA CC 1 dont les valeurs P_I et P_F sont toutes deux supérieures à 0,9 et dont la plage de stabilité prédite de la solution solide est complète entre 700 et 1300 °C selon toutes les bases de données thermodynamiques. Dans cette gamme de risque, cet alliage présente à la fois la meilleure CSSR et le meilleur ratio $CSSR/\rho$;
- le HEA CC 2 dont les valeurs P_I et P_F sont supérieures à 0,6 et dont la stabilité prédite de la solution solide est d’au moins une température entre 700 et 1300 °C selon toutes les bases de données thermodynamiques ; cet alliage présente le meilleur rapport résistance/masse volumique ;

- le HEA CC 3 dont les valeurs P_I et P_F sont toutes deux supérieures à 0,9 et dont la stabilité de la solution solide est d'au moins une température entre 700 et 1300 °C selon au moins une des quatre bases de données thermodynamiques; cet alliage présente la CSSR maximale;
- le HEA CC 4 dont les valeurs P_I et P_F sont toutes deux supérieures à 0,6 et dont la stabilité de la solution solide est d'au moins une température entre 700 et 1300 °C selon au moins une des quatre bases de données thermodynamiques. Cet alliage possède le meilleur rapport résistance/masse volumique pour ce niveau de risque.

Ces choix sont résumés dans le [tableau 4.3](#).

TABLEAU 4.3 — Critères de sélection et propriétés prédites des alliages sélectionnés pour fabrication.

		HEA CC 1	HEA CC 2	HEA CC 3	HEA CC 4
Critères $P_{I/F}$	$P_I > 0,9 + P_F > 0,9$	✓	—	✓	—
	$P_I > 0,6 + P_F > 0,6$	—	✓	—	✓
Plage de stabilité	∀ température/4 bases	✓	—	—	—
	1 température/4 bases	—	✓	—	—
	1 température/1 base	—	—	✓	✓
Critères de conception	Critère P_{IF}	0,845	0,549	0,825	0,542
	ρ (g.cm ⁻³)	5,12	5,10	9,10	5,30
	CSSR (MPa)	1103	1316	1367	1390
Compromis		CSSR CSSR/ ρ max.	CSSR/ ρ max.	CSSR max.	CSSR/ ρ max.

La composition des alliages sélectionnés est donnée dans le [tableau 4.4](#). Les résultats de la validation expérimentale préliminaire seront exposés à la suite du second cas d'optimisation.

TABLEAU 4.4 — Composition des alliages sélectionnés pour fabrication.

Alliage	Composition (%at.)
HEA CC 1	35Al - 35Cr - 19Mn - 5Ti - 6V
HEA CC 2	35Al - 35Cr - 8Mn - 5Mo - 17Ti
HEA CC 3	35Mo - 12Ta - 9Ti - 9V - 35Zr
HEA CC 4	35Al - 35Cr - 6Mo - 13Ti - 6V - 5Zr

4.5 Optimisation d'alliages à forte entropie de structure cristalline cubiques à faces centrées

Dans cette partie, l'optimisation est conduite de façon identique à la précédente, dans le même espace de recherche et suivant les mêmes critères. Seul le but diffère : ne sont recherchés que des alliages possédant une structure Cubique à Faces Centrées (CFC). En effet, la précédente optimisation, réalisée sans *a priori* sur la structure cristalline des alliages à optimiser, n'a dans la pratique conduit qu'à des alliages dont la structure prédite est cubique centrée. Les raisons en seront discutées ultérieurement, mais il semble malgré tout intéressant de tenter de concevoir des alliages cubiques à faces centrées. En effet, certains HEA CFC existants possédant déjà des combinaisons de propriétés attractives,²⁴⁵ il serait intéressant de viser des propriétés optimisées.

Afin de mener à bien la recherche d’alliages possédant une structure cubique à faces centrées, un objectif est adjoint : la structure cristalline prédite. Il s’agit d’un critère binaire : un alliage possède soit une structure CFC (valeur 1), soit une autre (valeur 0); ce nouvel objectif est donc à maximiser.

La structure cristalline est prédite par le modèle déjà évoqué²³² à partir de la concentration moyenne en électrons de valence VEC et du nombre moyen d’électrons itinérants par atome e/a.

4.5.1 Résultats

De la même façon que précédemment, l’évaluation d’environ huit millions d’alliages a été conduite en une centaine d’heures par cinquante instances successives d’optimisation. L’évolution du ratio d’amélioration relatif (figure 4.21) semble là aussi indiquer une convergence correcte.

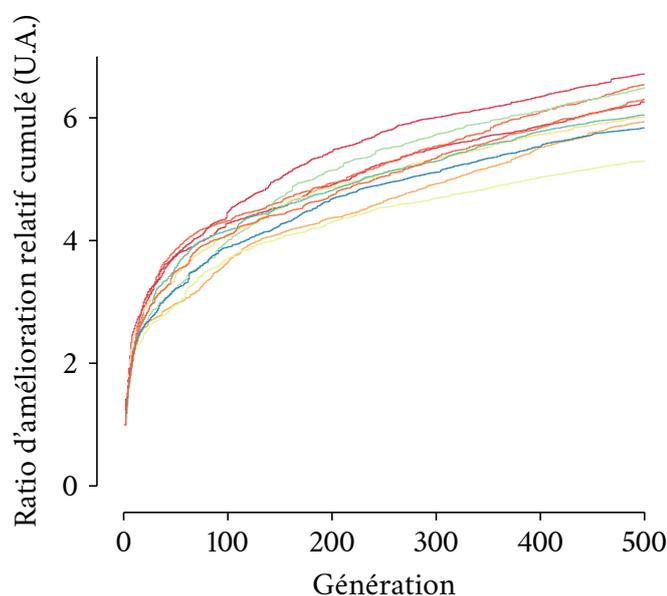


Figure 4.21 — Ratio d’amélioration relatif cumulé en fonction de la génération, représenté pour dix des cinquante optimisations identiques (une par couleur).

La figure 4.22 présente l’ensemble de Pareto composé de 2245 alliages, tous prédits de structure CFC. La contribution de la solution solide au renforcement est représentée en fonction de la masse volumique tandis que la couleur symbolise le critère P_{IF} .

Ici encore, l’allure de l’ensemble de Pareto témoigne des nécessaires compromis à faire entre masse volumique, résistance et respect de la constitution d’un HEA : les alliages les plus susceptibles d’être monophasés sont également les moins résistants. La CSSR et le critère P_{IF} couvrent une large gamme de valeurs : 320 à 1300 MPa et 0,4 à 0,9 respectivement; la plage de masse volumique est plus réduite que dans le cas précédent, étant comprise entre 7,3 et 9,9 g.cm⁻³. La répartition des alliages n’est pas uniforme : des masses volumiques et des résistances faibles à intermédiaires semblent avoir été favorisées, tandis que les valeurs peu élevées du critère P_{IF} sont surreprésentées.

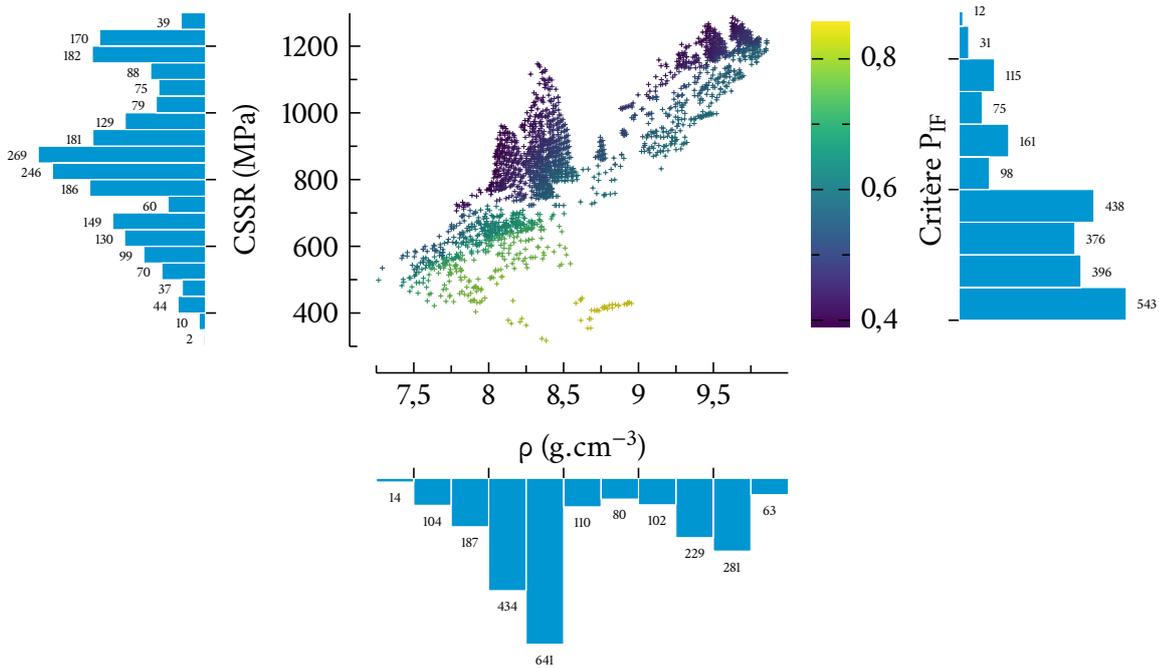


Figure 4.22 — Résultats de l’optimisation. La figure du centre représente l’ensemble de Pareto tridimensionnel : la contribution de la solution solide (CSSR) est tracée en fonction de la masse volumique ρ ; en couleur est symbolisé le critère P_{IF} . Les histogrammes présentent la répartition des alliages optimaux selon les trois objectifs, suivant l’axe auquel ils sont adossés (de gauche à droite : CSSR, masse volumique, critère P_{IF}). À chaque barre correspond un nombre d’alliages.

Ces gammes de propriétés sont plus limitées que dans le cas d’optimisation précédent sans contrainte sur la structure cristalline (figure 4.11), à l’issue de laquelle les alliages optimaux présentaient tous une structure prédite CC. Cette unicité de structure s’explique par le positionnement plus compétitif de ces alliages comparés aux alliages de structure CFC (figure 4.23) qui ne sont ainsi pas retenus lors d’une optimisation pendant laquelle ils concourent avec des alliages de structure CC.

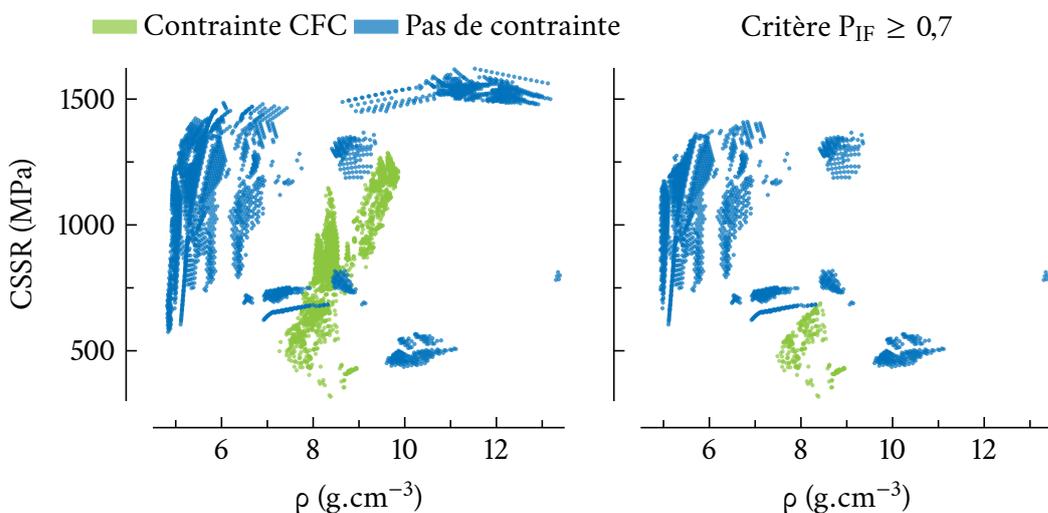


Figure 4.23 — Comparaison de l’allure des ensembles de Pareto des optimisations sans et avec la contrainte sur la structure cristalline menant l’optimisation vers des alliages de structure CFC ; à gauche pour toute valeur du critère P_{IF} ; à droite seulement pour $P_{IF} \geq 0,7$.

La gamme de composition des alliages optimaux est cependant diverse : la [figure 4.24](#) montre la distribution des éléments ; les teneurs nulles ne sont pas affichées.

À l'inverse de l'optimisation précédente, le chrome, l'aluminium, le titane et le zirconium ne sont plus les éléments principaux. Les deux premiers sont toujours employés mais en quantité plus faible ; le titane n'est présent marginalement que dans 4 % des alliages ; le zirconium est absent des alliages optimaux. Les éléments prépondérants sont :

- le cobalt et le fer, utilisés sur toute la plage possible ;
- le nickel, présent principalement au-delà de 25 %_{at.} ;
- le cuivre, présent en faible quantité (5-10 %_{at.}) ou en forte quantité (30-35 %_{at.}) ;
- le manganèse, majoritairement présent à hauteur de 5 à 15 %_{at.} mais également utilisé jusqu'à 35 %_{at.}.

Le molybdène, le niobium, le titane, le vanadium, le tungstène et le ruthénium sont présents entre 5 et 10 %_{at.} dans un nombre significatif d'alliages. Le tantale et le hafnium ne sont pas exploités par l'algorithme d'optimisation.

De façon similaire à la première optimisation, la [figure 4.24](#) montre également que la répartition des éléments se fait majoritairement aux extrêmes de la gamme de composition possible. Cette tendance à s'éloigner des compositions équimolaires est confirmée par la [figure 4.25](#) sur laquelle le nombre d'alliages optimaux par tranche d'écart moyen à la composition équimolaire est présenté.

La [figure 4.25](#) met en évidence qu'aucun alliage optimal n'est équimolaire ; au contraire, environ 70 % d'entre eux présentent un écart moyen de plus de 9,5 %_{at.} par rapport à la composition équimolaire.

Les alliages optimaux se répartissent dans 69 familles différentes, dont :

- 27 à cinq éléments (pour un total de 929 alliages) ;
- 29 à six éléments (1091 alliages) ;
- 12 à sept éléments (211 alliages) ;
- une à huit éléments (14 alliages AlCoCrCuFeMnNiRu).

Les dix principales familles (par fréquence d'occurrence) sont listées dans le [tableau 4.5](#). Ces dix familles regroupent 72 % des alliages optimaux.

TABLEAU 4.5 — Les dix familles d'alliages optimaux les plus représentées à l'issue de l'optimisation restreignant les résultats à la structure CFC ; le nombre d'alliages par famille est indiqué à droite.

Famille	Nombre d'alliages
Co - Cr - Fe - Mn - Nb - Ni	324
Co - Fe - Mn - Nb - Ni	304
Co - Fe - Mn - Ni - W	252
Al - Cr - Cu - Mn - Ni - Ru	175
Co - Cu - Fe - Mn - Ni - W	165
Co - Fe - Mn - Ni - V	131
Co - Cr - Cu - Fe - Mn - Ni - W	100
Co - Cr - Cu - Fe - Ni - W	65
Al - Cr - Cu - Fe - Ni - Ru	48
Co - Cr - Fe - Mn - Ni - W	47

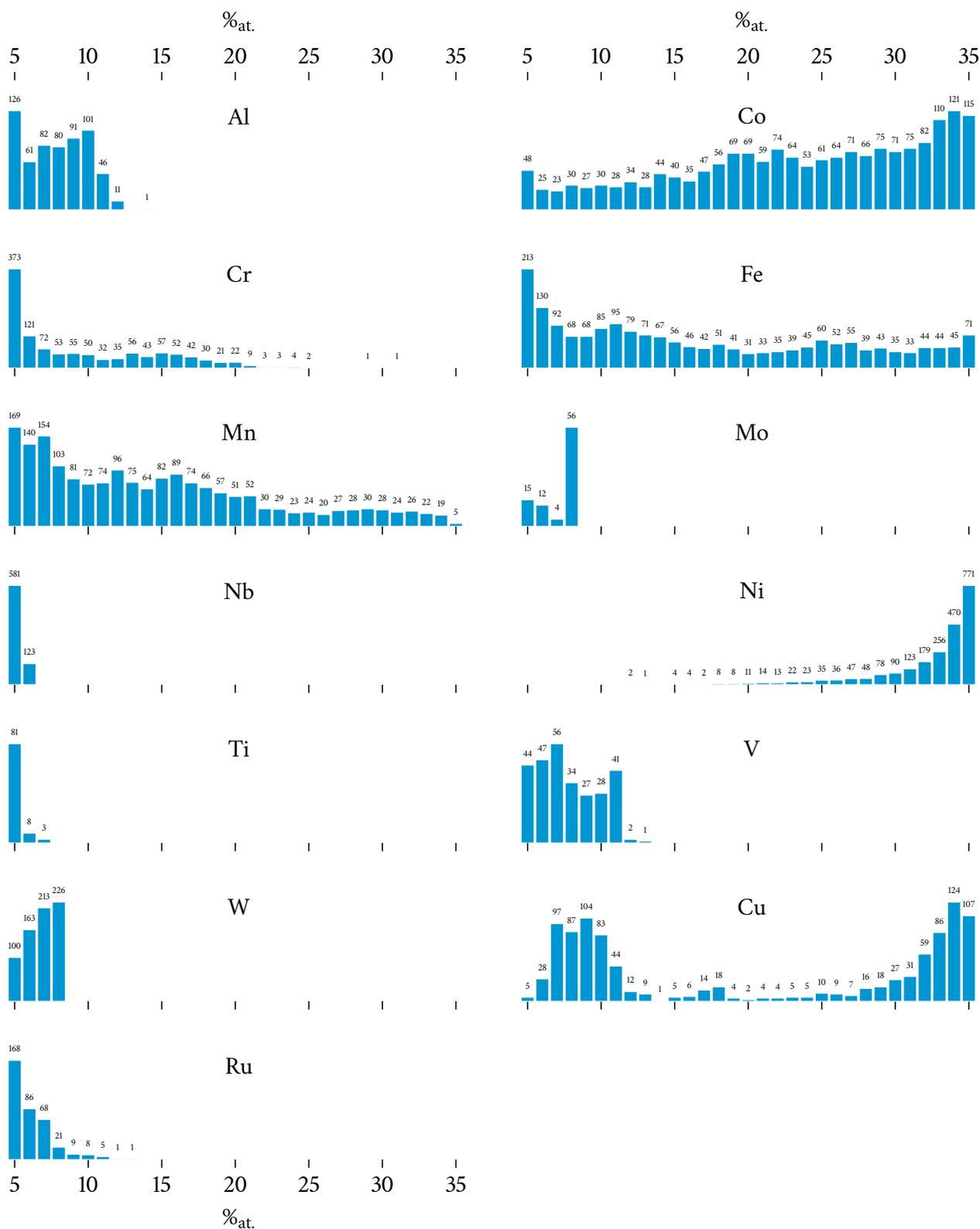


Figure 4.24 — Répartition des éléments dans les alliages optimaux. Seules les teneurs supérieures à zéro sont montrées. À chaque barre correspond un nombre d'alliages comportant la teneur indiquée en abscisse.

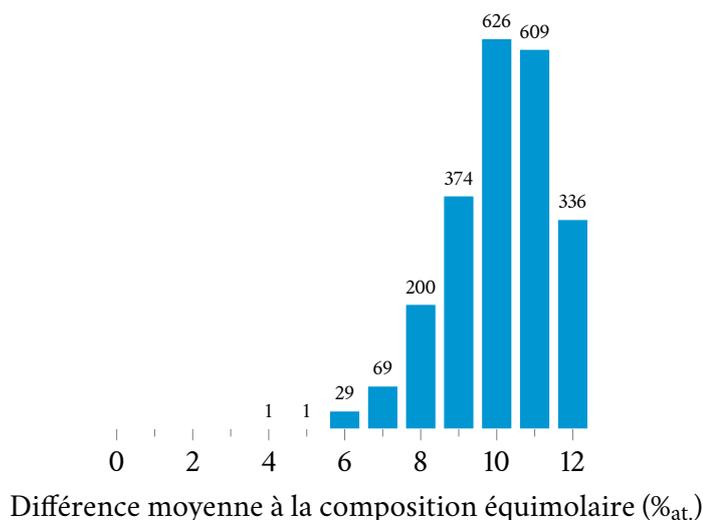


Figure 4.25 — Nombre d'alliages optimaux par tranche d'écart moyen à la composition équimolaire.

La figure 4.26 illustre la diversité des familles d'alliages optimaux, en montrant la localisation des éléments dans l'espace des objectifs. Le recours massif au nickel est ainsi mis en évidence, comme l'est celui, plus modéré et à basse masse volumique, du cuivre. Ce dernier est souvent accompagné de l'aluminium, du chrome, du titane et du ruthénium. Le fer, le cobalt et le manganèse semblent plutôt délimiter différentes familles d'alliages aux masses volumiques intermédiaires et élevées. L'utilisation du molybdène, du niobium et du tungstène demeure comparativement très « localisée ». Le vanadium, élément très présent dans l'optimisation précédente, est majoritairement employé dans une zone de masse volumique et de résistance intermédiaires.

4.5.2 Confrontation des résultats avec la thermodynamique prédictive

De la même manière que précédemment, la thermodynamique prédictive est utilisée pour prédire l'équilibre des alliages optimaux à différentes températures, auxquelles est vérifiée leur constitution (monophasée ou non). Le nombre de températures auxquelles une solution solide unique est prédite (la « plage de stabilité ») est ensuite confronté au critère P_{IF} calculé au cours de l'optimisation. Du fait des restrictions sur le nombre d'éléments inclus dans certaines bases (entre autres, TCNI7 n'inclut pas le cuivre), les calculs thermodynamiques ne sont conduits que sur 1214 des 2245 alliages optimaux.

La figure 4.27 montre les résultats de ces calculs avec la base de données TCNI7. La tendance de diminution du nombre d'alliages prédits non-HEA par la thermodynamique avec l'augmentation du critère P_{IF} est quelque peu balayée par la proportion de non-HEA toujours supérieure à 50 % selon TCNI7.

La figure 4.28, présentant les résultats des calculs exploitant la base de données TTNI8, illustre une tendance inverse : le nombre d'alliages prédits non-HEA par la thermodynamique augmente avec le critère P_{IF} . Néanmoins, la proportion d'alliages constitués d'une seule solution solide à au moins une température demeure au-dessus de 80 %.

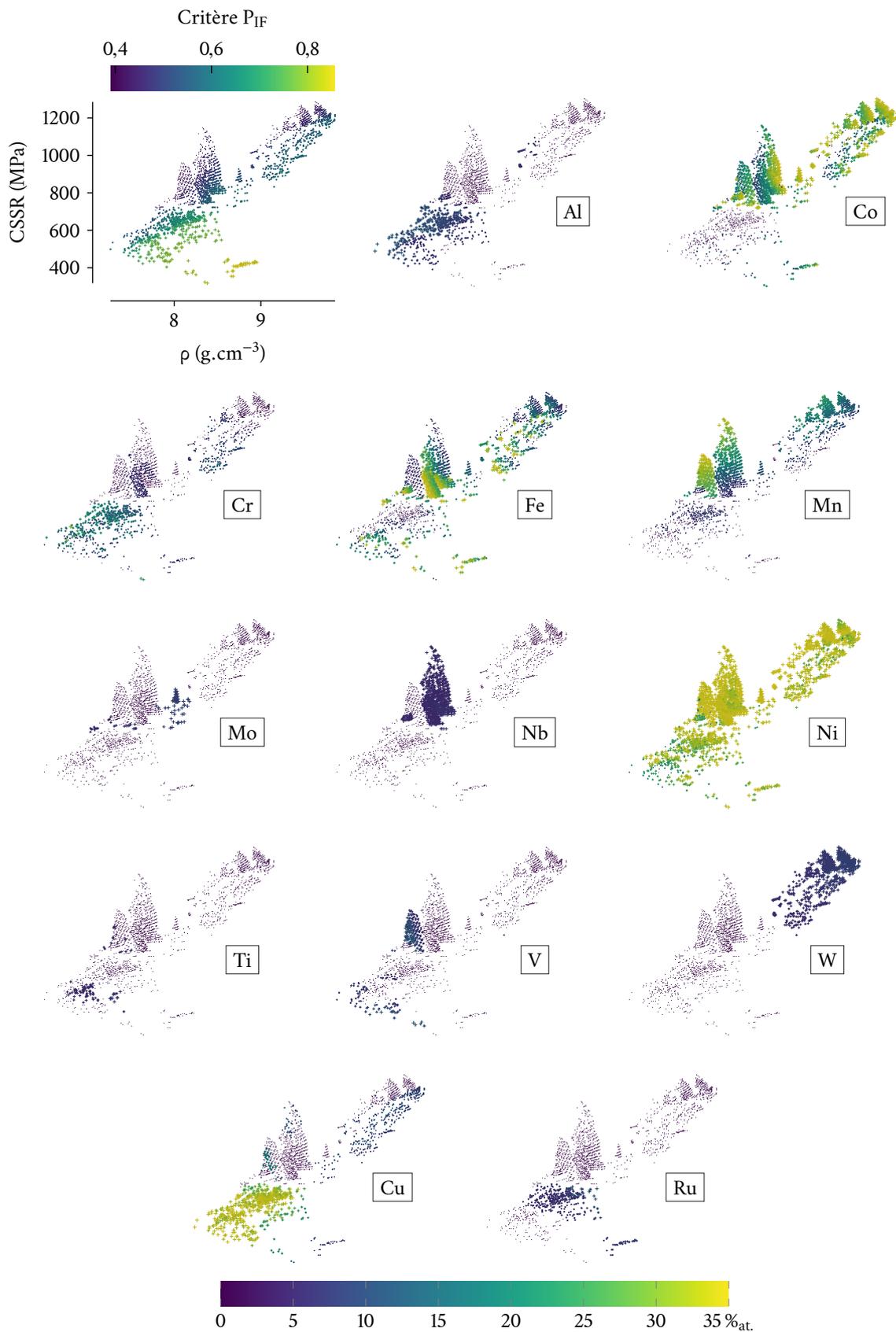


Figure 4.26 — Répartition des teneurs en éléments dans l'espace des objectifs. Chaque graphe représente l'ensemble de Pareto de la [figure 4.22](#) (reproduit en haut à gauche); la couleur indique la proportion de l'élément indiqué en encart (légende du bas).

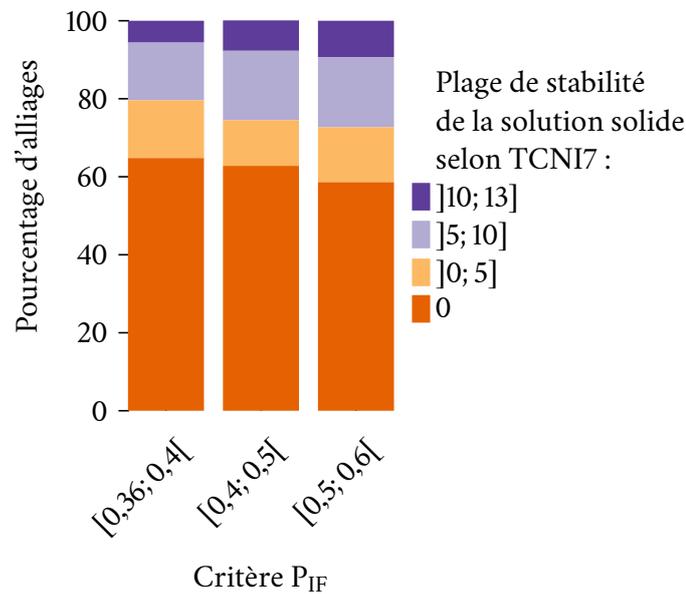


Figure 4.27 — Pourcentage d'alliages dont la plage de stabilité de la solution solide est comprise, selon TCNI7, entre 0 et 13 en fonction de la valeur de leur critère P_{IF} . Une plage égale à x ($x > 0$) signifie que la solution solide est l'unique phase prédite par TCNI7 sur un nombre de températures égal à $(x - 1) \times 50$ °C entre 700 et 1300 °C. Au maximum, pour $x = 13$, la plage s'étend de 700 à 1300 °C. Idéalement, le pourcentage d'alliages dans la plage $]10; 13]$ devrait augmenter avec le critère P_{IF} . Ne sont représentés sur l'histogramme que les alliages vérifiant le critère P_{IF} ($P_I \geq 0,6$ et $P_F \geq 0,6$).

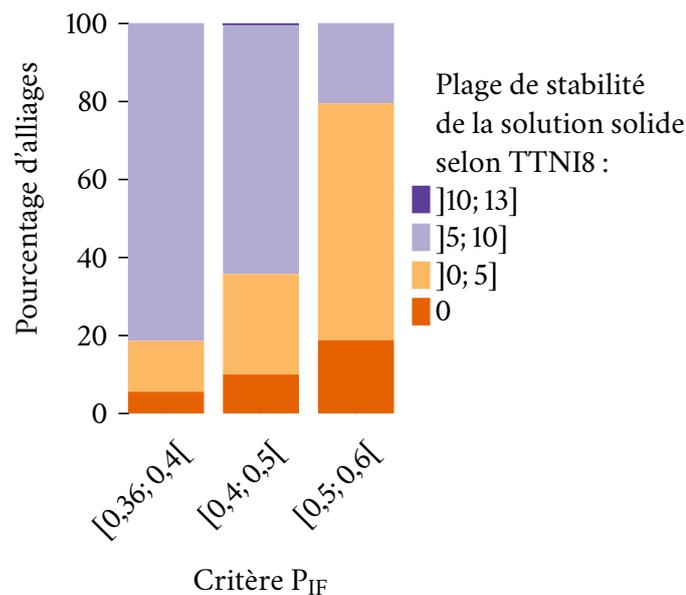


Figure 4.28 — Pourcentage d'alliages dont la plage de stabilité de la solution solide est comprise, selon TTNI8, entre 0 et 13 en fonction de la valeur de leur critère P_{IF} .

Des observations similaires peuvent être formulées à propos des résultats des calculs avec la base de données TCFE8 (figure 4.29) : la proportion de HEA prédits stables à au moins une température demeure majoritaire à plus de 95 %.

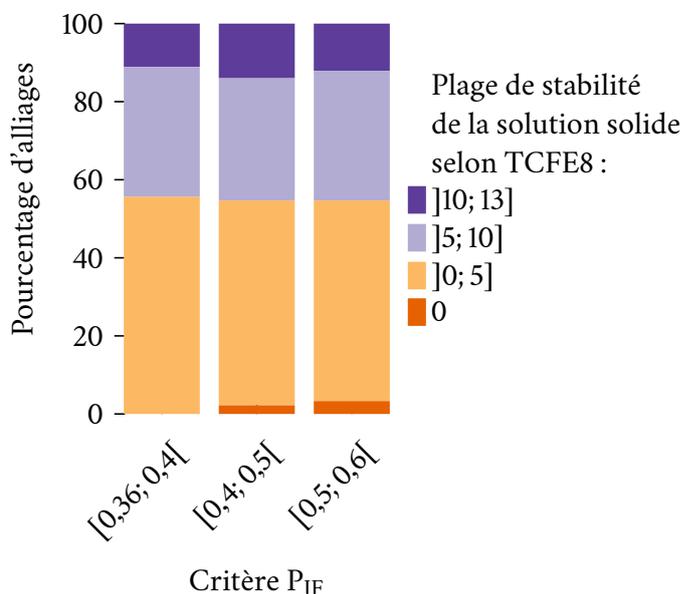


Figure 4.29 — Pourcentage d'alliages dont la plage de stabilité de la solution solide est comprise, selon TCFE8, entre 0 et 13 en fonction de la valeur de leur critère P_{IF} .

La figure 4.30 illustre la diminution du nombre d'alliages prédits non-HEA par la thermodynamique (selon la base de données SSOL5) avec l'augmentation de la valeur du critère P_{IF} .

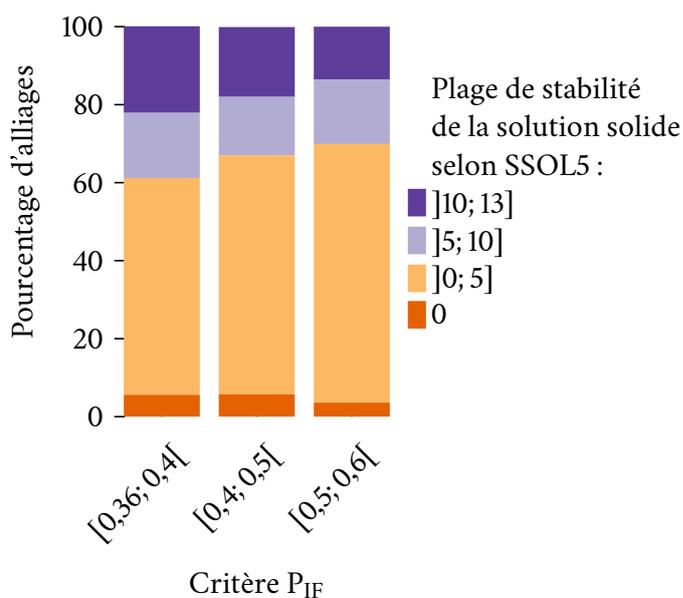


Figure 4.30 — Pourcentage d'alliages dont la plage de stabilité de la solution solide est comprise, selon SSOL5, entre 0 et 13 en fonction de la valeur de leur critère P_{IF} .

De manière générale, les prédictions de la base de données thermodynamiques TCNI7 demeurent « pessimistes » comparativement aux trois autres bases de données, un nombre faible de supposés HEA étant prédits (figure 4.31).

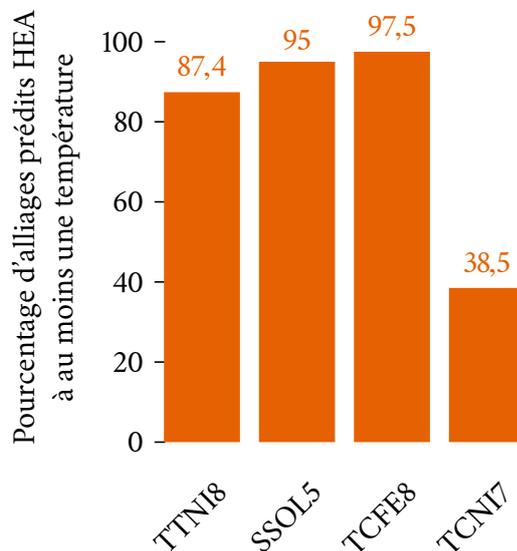


Figure 4.31 — Pourcentage d'alliages optimaux (dont le critère P_{IF} est respecté) prédits HEA à au moins une température selon la base de données thermodynamiques employée.

La figure 4.32 met néanmoins en évidence l'accord global des bases de données. En effet, la constitution monophasée de 87 % des alliages optimaux à au moins une température est simultanément corroborée par au moins trois des quatre bases de données thermodynamiques. De plus, tous les alliages dont le critère P_{IF} est respecté sont prédits monophasés à au moins une température par au moins une base de données thermodynamiques.

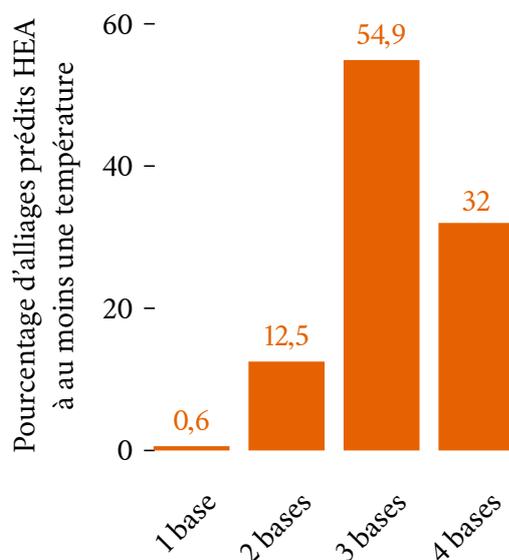


Figure 4.32 — Pourcentage d'alliages optimaux (dont le critère P_{IF} est respecté) prédits HEA à au moins une température selon une, deux, trois ou les quatre bases de données thermodynamiques.

4.5.3 Sélection d'alliages CFC pour fabrication

Plusieurs alliages ont été choisis parmi les résultats pour être fabriqués. À l'inverse du premier cas d'optimisation, il n'existe pas d'alliage prédit monophasé à toutes les températures entre 700 et 1300 °C selon les quatre bases de données. Au maximum quelques alliages sont estimés monophasés à quatre températures selon toutes les bases. Parmi ces alliages ont été sélectionnés les alliages du [tableau 4.6](#). Ces trois alliages correspondent à trois critères de sélection :

- HEA CFC 1 : masse volumique ρ minimale ;
- HEA CFC 2 : CSSR maximale ;
- HEA CFC 3 : ratio CSSR/ ρ maximal.

TABLEAU 4.6 — Composition et caractéristiques des alliages CFC sélectionnés à l'issue de l'optimisation.

Alliage	Composition (% _{at.})	Critère P _{IF}	ρ (g.cm ⁻³)	CSSR (MPa)
HEA CFC 1	10Al - 17Co - 34Fe - 5Mo - 34Ni	0,409	7,79	721
HEA CFC 2	35Co - 8Fe - 21Mn - 28Ni - 8W	0,392	9,63	1285
HEA CFC 3	22Co - 6Fe - 32Mn - 5Nb - 35Ni	0,403	8,34	1138

4.6 Résultats préliminaires de la validation expérimentale

Les alliages ont été fabriqués dans un four de fusion à arc électrique sous vide à l'université de Cambridge dans le cadre d'une collaboration. Les barreaux résultants sont de section elliptique de ~1,5 cm sur 1 cm et mesurent 10 cm de long. À l'université de Nantes, ces échantillons ont subi un traitement thermique d'homogénéisation sous vide secondaire dont la température a été choisie avec l'aide de Thermo-Calc et des quatre bases de données mentionnées précédemment.

Deux techniques de caractérisation ont été exploitées afin d'étudier la structure de ces alliages : la microscopie électronique à balayage (MEB Zeiss Merlin) suppléée d'une sonde d'analyse par spectroscopie dispersive en énergie (EDS — 20 kV, distance de travail de 8 mm) et la diffractométrie de rayons X (DRX) avec la raie K α du cuivre. Ces caractérisations constituent une première étape vers la vérification du caractère monophasé de ces alliages. La microdureté Vickers de ces derniers a également été mesurée sous une charge de 0,5 kg (4,9 N) ; les valeurs données dans les parties suivantes sont moyennées sur dix mesures.

L'étude par microscopie optique en réflexion de ces alliages à forte entropie aurait nécessité la recherche d'une attaque métallographique adaptée à chaque alliage ; par manque de temps, celle-ci n'a été menée que partiellement. L'interprétation difficile des observations résultantes a motivé l'utilisation exclusive, dans un premier temps, de la microscopie électronique à balayage.

En outre, seul un traitement thermique par alliage a été conduit. Les résultats présentés dans les sections suivantes sont donc préliminaires et les conclusions tirées sur le « potentiel » des alliages testés peuvent ne pas être définitives.

4.6.1 HEA CC 1

L'alliage HEA CC 1 a subi un traitement d'homogénéisation à 1300 °C pendant 24 h. À l'issue de ce traitement, l'imagerie en électrons rétrodiffusés ([figure 4.33](#)) ne permet pas de mettre en évidence un contraste de composition. La composition de l'échantillon, déterminée par EDS sur la section montrée sur la [figure 4.33](#), est 35Al-45Cr-3Mn-9Ti-8V (en %_{at.}), la composition nominale



Figure 4.33 — Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 1.

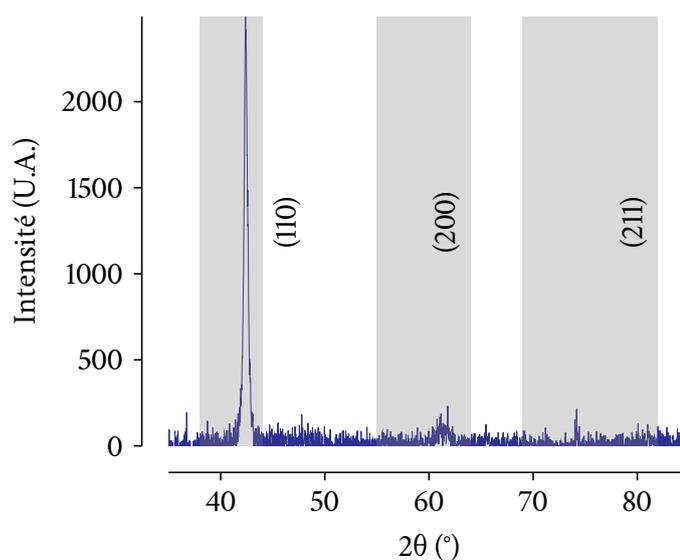


Figure 4.34 — Diffractogramme de l'alliage HEA CC 1. Les zones grisées symbolisent les gammes d'angles de diffraction auxquels un pic est *a priori* attendu.

étant 35Al-35Cr-19Mn-5Ti-6V. L'écart de teneur en manganèse pourrait provenir d'une évaporation excessive lors de la fabrication.

La [figure 4.34](#) présente le diffractogramme de l'alliage HEA CC 1. L'intensité est donnée en unité arbitraire (U.A.). Les zones grisées symbolisent les gammes d'angles de diffraction auxquels un pic est *a priori* attendu au regard des pics de diffraction des éléments de structure CC tels le chrome, le fer, le molybdène, le niobium, le tantale et le tungstène.

Sur ce diffractogramme, un pic est nettement visible (celui correspondant au plan (110)); les pics (200) et (211) semblent exister mais ne dépassent que de peu le bruit de fond. La faible intensité des pics peut s'expliquer par le mode de fabrication (alliage non-corroyé) et/ou le traitement d'homogénéisation (24 h à 1300 °C) conduisant à une taille de grains devant être proche des dimensions

de l'échantillon ayant servi à la détermination du diffractogramme. Néanmoins, la présence d'un nombre limité de pics de diffraction tend à confirmer l'homogénéité de l'échantillon observée au MEB (figure 4.33). La position du pic du plan (110) permet de déduire le paramètre de la maille cristalline et de calculer une masse volumique d'environ $5,22 \text{ g.cm}^{-3}$. Il est à noter la possible contamination de l'échantillon par du nitrure de titane TiN, indiquée notamment par la présence d'un pic à $36,7^\circ$ (cf. explication de la figure 4.36 dans le cas de l'alliage HEA CC 2).

La microdureté de l'échantillon homogénéisé s'élève à $615 \pm 72 \text{ HV}_{0,5}$, soit $6,03 \pm 0,71 \text{ GPa}$.

4.6.2 HEA CC 2

L'échantillon HEA CC 2 a subi un traitement d'homogénéisation à 1300°C pendant 24 h. Ici encore, l'imagerie en électrons rétrodiffusés (figure 4.35) ne permet pas de mettre en évidence un contraste de composition. La composition de l'échantillon, déterminée par EDS sur la section montrée sur la figure 4.35, est 31Al-37Cr-7Mn-6Mo-19Ti (en %_{at.}), la composition nominale étant 35Al-35Cr-8Mn-5Mo-17Ti.

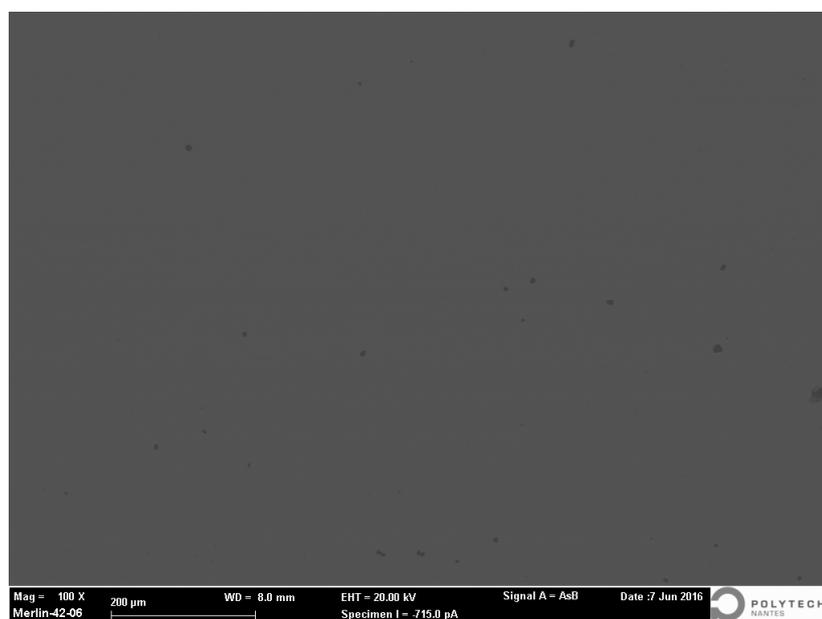


Figure 4.35 — Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 2.

Le diffractogramme de l'alliage HEA CC 2 (figure 4.36) révèle trois pics aux alentours de 40° . Deux d'entre eux (à $36,7^\circ$ et $42,6^\circ$) sont dus à la présence de nitrure de titane TiN formés pendant le traitement thermique sous un vide insuffisant. Le diffractogramme semble cependant confirmer l'homogénéité de l'alliage. La position du pic du plan (110) permet de calculer une masse volumique d'environ $6,0 \text{ g.cm}^{-3}$.

La microdureté de l'alliage HEA CC 2 s'élève à $655 \pm 38 \text{ HV}_{0,5}$, soit $6,45 \pm 0,37 \text{ GPa}$.

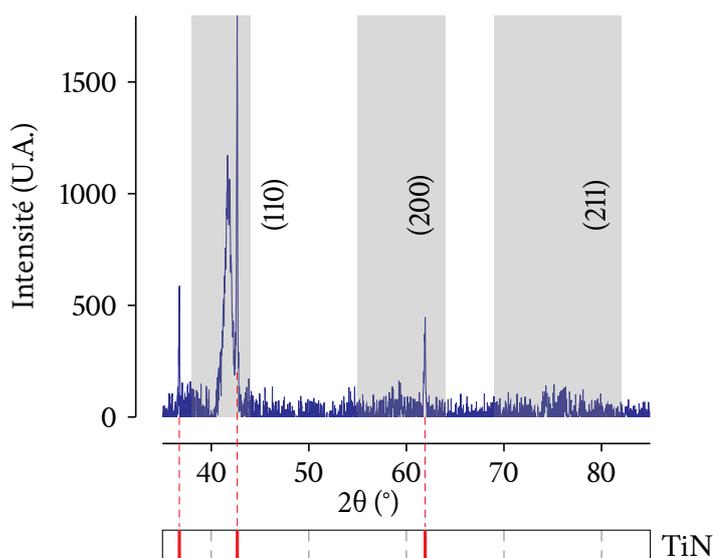


Figure 4.36 — Diffractogramme de l'alliage HEA CC 2. Les zones grises symbolisent les gammes d'angles de diffraction auxquels un pic est *a priori* attendu.

4.6.3 HEA CC 3

Un traitement d'homogénéisation de 24 h à 1100°C a été appliqué à l'alliage HEA CC 3. À l'issue de ce traitement, la microstructure n'est clairement pas homogène (figures 4.37 et 4.38). La composition globale de l'alliage, mesurée par EDS sur une large surface (typiquement celle montrée sur la figure 4.37), est 27Mo-10Ta-11Ti-6V-46Zr (en %_{at.}), la composition nominale étant 35Mo-12Ta-9Ti-9V-35Zr.

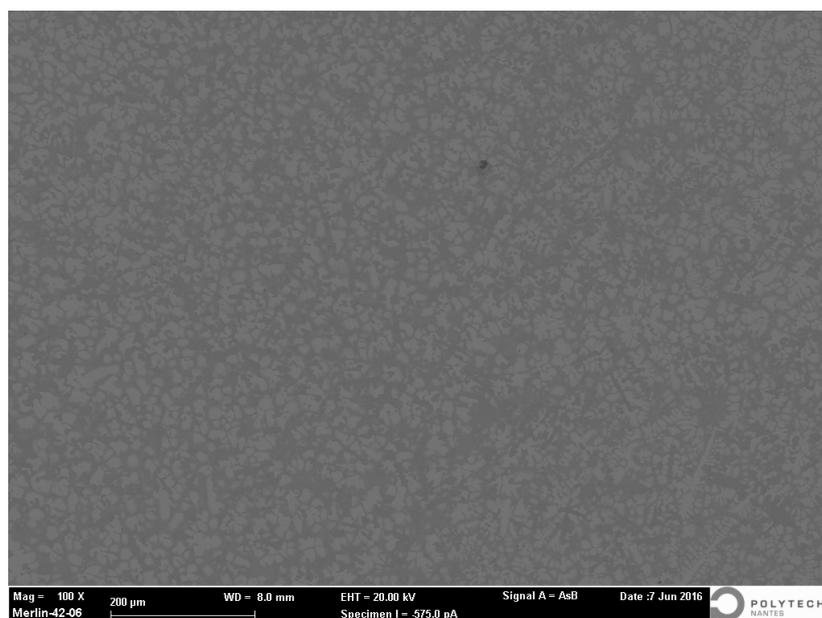


Figure 4.37 — Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 3.

L'alliage est notamment constitué d'une phase riche en molybdène et en tantale (zones claires sur la figure 4.38), d'une phase riche en zirconium et en titane (zones sombres) et d'une phase riche en molybdène, zirconium et tantale (zones de coloration intermédiaire).

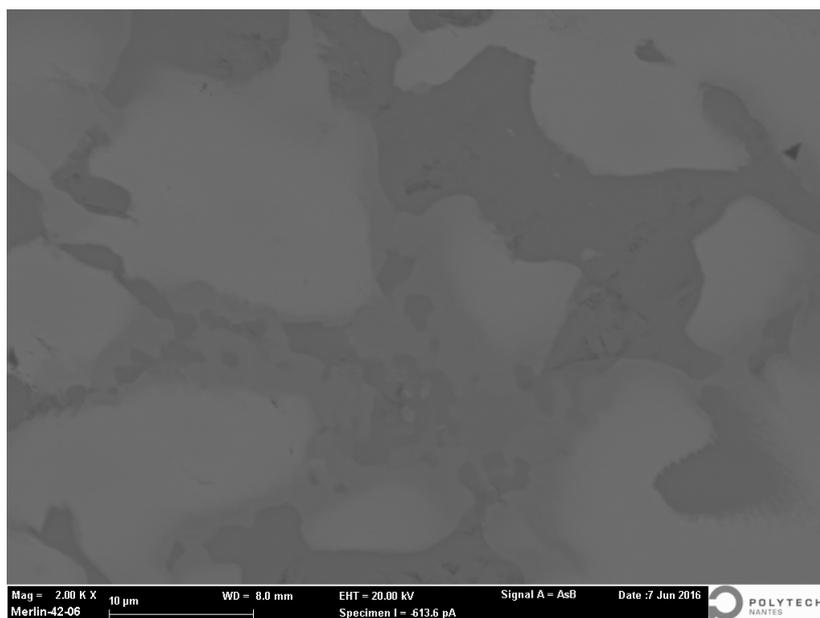


Figure 4.38 — Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 3.

Le caractère multiphasé est confirmé par le diffractogramme (figure 4.39).

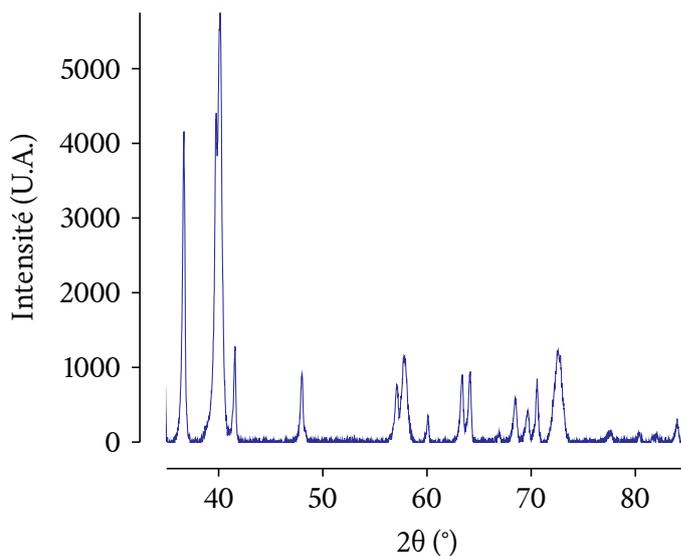


Figure 4.39 — Diffractogramme de l'alliage HEA CC 3.

La microdureté de l'alliage HEA CC 3 s'élève à $717 \pm 25 \text{ HV}_{0,5}$ soit $7,03 \pm 0,25 \text{ GPa}$.

Il est à noter qu'un traitement supplémentaire de 120 h à 1300 °C n'a pas suffi à homogénéiser la microstructure de cet alliage.

4.6.4 HEA CC 4

Traité à 1300 °C pendant 24 h, l'alliage HEA CC 4 présente une constitution inhomogène (figures 4.40 et 4.41) avec une phase riche en chrome, en zirconium et en aluminium (zones claires sur les figures) et une phase riche en chrome, en aluminium, en molybdène et en titane (zones sombres).

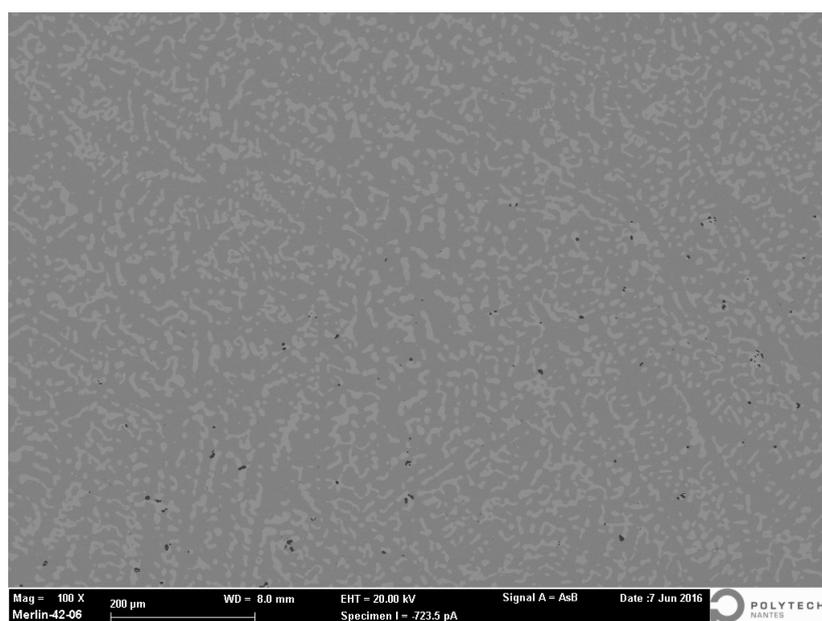


Figure 4.40 — Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 4. Les zones noires sont des pores.

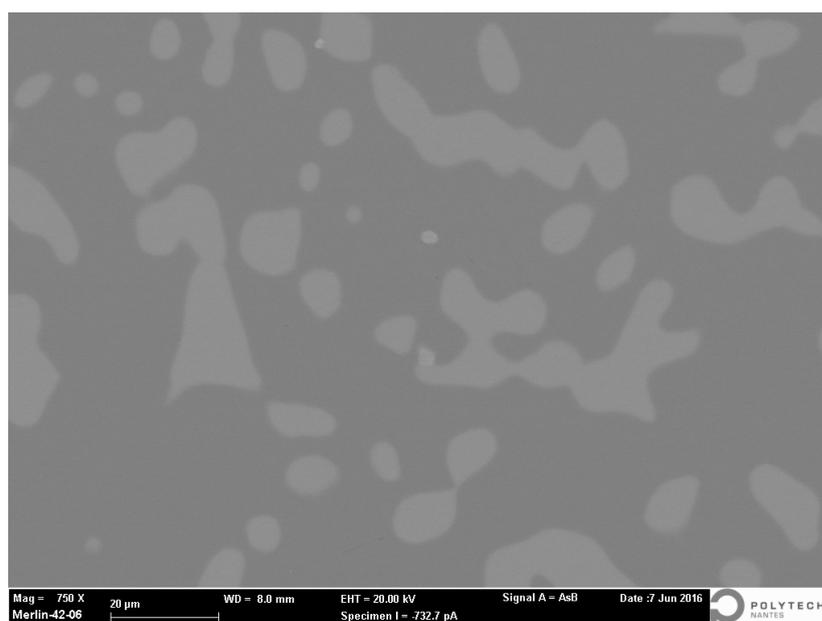


Figure 4.41 — Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CC 4.

La composition de l'alliage telle que mesurée par EDS sur la surface montrée sur la [figure 4.40](#) est 32Al-36Cr-7Mo-14Ti-6V-6Zr (en %_{at.}), la composition nominale étant 37Al-35Cr-6Mo-13Ti-6V-5Zr.

La présence de plusieurs phases au sein de l'alliage est confirmée par le diffractogramme ([figure 4.42](#)).

La microdureté de l'alliage HEA CC 4 s'élève à $679 \pm 45 \text{ HV}_{0,5}$ soit $6,66 \pm 0,44 \text{ GPa}$.

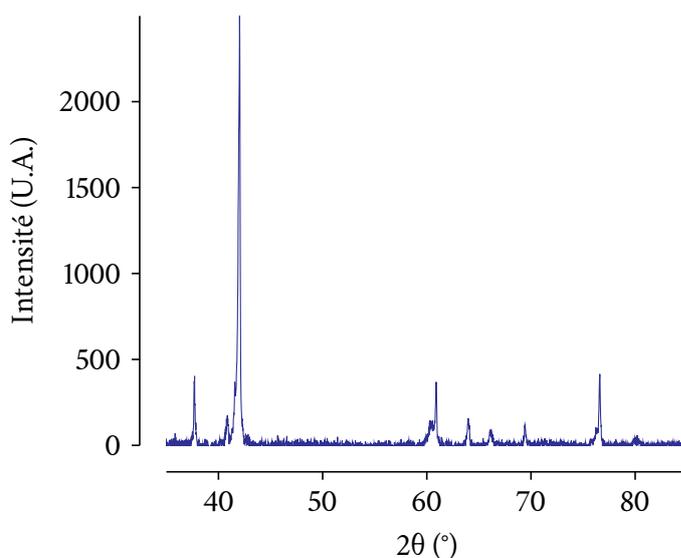


Figure 4.42 — Diffractogramme de l'alliage HEA CC 4.

4.6.5 HEA CFC 1

L'alliage HEA CFC 1 a subi un traitement d'homogénéisation à 1300 °C pendant 24 h. À l'issue de celui-ci, l'alliage paraît homogène comme semble le montrer l'imagerie en électrons rétrodiffusés (figure 4.43).

L'EDS permet de déterminer la composition de l'alliage (en %_{at.}) : 9Al-17Co-35Fe-5Mo-33Ni (la composition nominale est 10Al-17Co-34Fe-5Mo-34Ni).

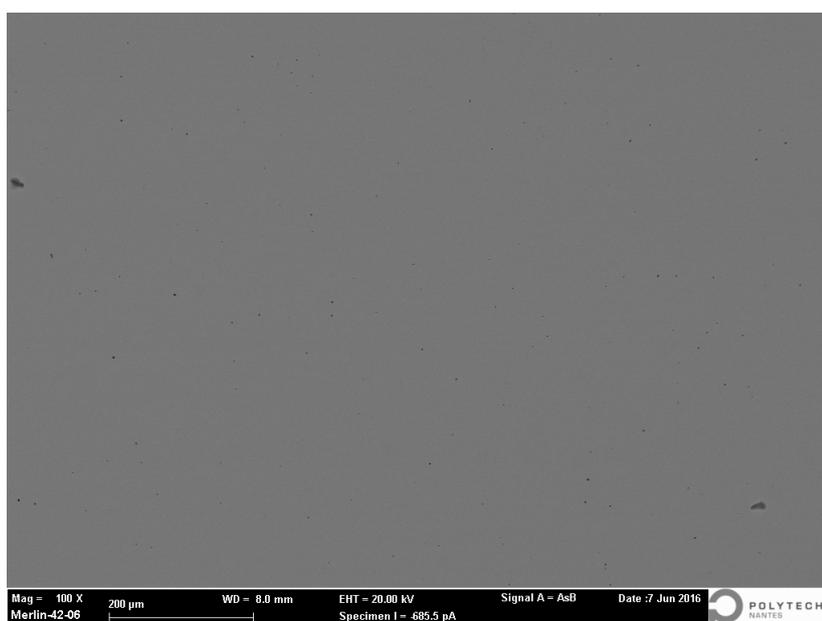


Figure 4.43 — Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CFC 1. Les zones noires sont des pores.

La figure 4.44 présente le diffractogramme de l'alliage HEA CFC 1. Les zones grisées symbolisent les gammes d'angles de diffraction auxquels un pic est a priori attendu au regard des pics de diffraction des éléments de structure CFC tels l'aluminium, l'argent, le cuivre, le nickel, le platine.

Deux des pics correspondant aux plans (111) et (200) sont visibles sur le diffractogramme. L'absence de pic supplémentaire se détachant nettement du fond continu très bruité tend à confirmer l'homogénéité de la constitution de l'alliage, cette conclusion étant toutefois à modérer en raison du fort bruit sur le fond continu. Cette mesure est sans doute bruitée à cause de l'importante taille de grains à l'issue du traitement d'homogénéisation.

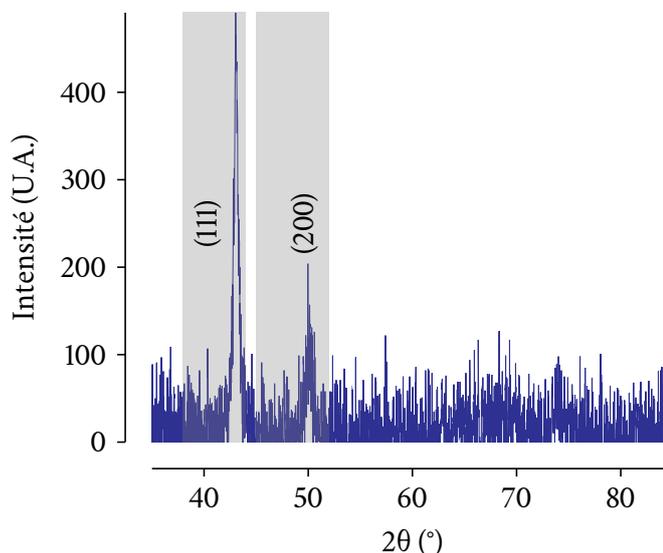


Figure 4.44 — Diffractogramme de l'alliage HEA CFC 1.

La masse volumique calculée à partir de la position du premier pic est d'environ $7,83 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

La dureté de l'alliage HEA CFC 1 est nettement inférieure à celle des alliages de structure CC; elle s'élève à $182 \pm 16 \text{ HV}_{0,5}$, soit $1,78 \pm 0,16 \text{ GPa}$.

4.6.6 HEA CFC 2

Recuit à 1200°C pendant 24 h, l'alliage HEA CFC 2 présente deux phases principales (figures 4.45 et 4.46). La composition globale de l'alliage, mesurée par EDS dans la zone montrée sur la figure 4.45, est 33Co-9Fe-21Mn-28Ni-9W, la composition nominale étant 35Co-8Fe-21Mn-28Ni-8W (en %_{at.}).

Sur la figure 4.46, la phase sombre est riche en cobalt, en nickel, en tungstène et en manganèse tandis que la phase claire est riche en tungstène et en cobalt.

Ces deux phases semblent partager une structure cristalline proche au vu du diffractogramme (figure 4.47) sur lequel trois pics de diffraction correspondant *a priori* aux plans (111), (200) et (220) sont clairement visibles.

La microdureté de l'alliage HEA CFC 2 s'élève à $213 \pm 26 \text{ HV}_{0,5}$, soit $2,09 \pm 0,25 \text{ GPa}$.

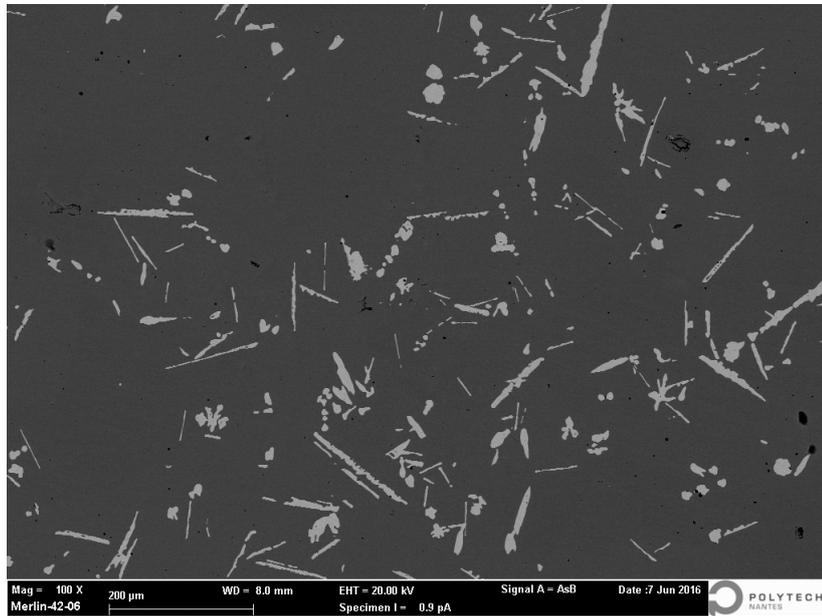


Figure 4.45 — Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CFC 2. Les zones noires sont des pores.

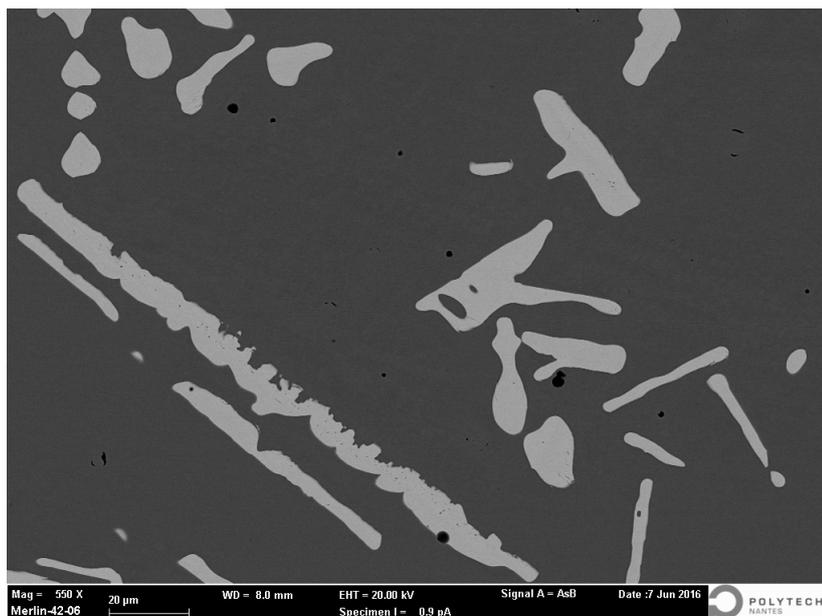


Figure 4.46 — Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CFC 2. Les zones noires sont des pores.

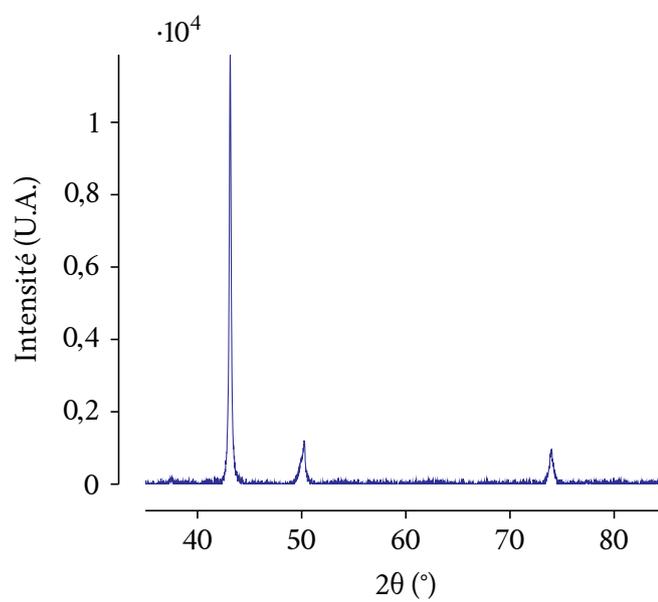


Figure 4.47 — Diffractogramme de l'alliage HEA CFC 2.

4.6.7 HEA CFC 3

L'alliage HEA CFC 3 présente encore une structure de solidification dendritique après un traitement d'homogénéisation de 24 h à 1050 °C (figure 4.48).

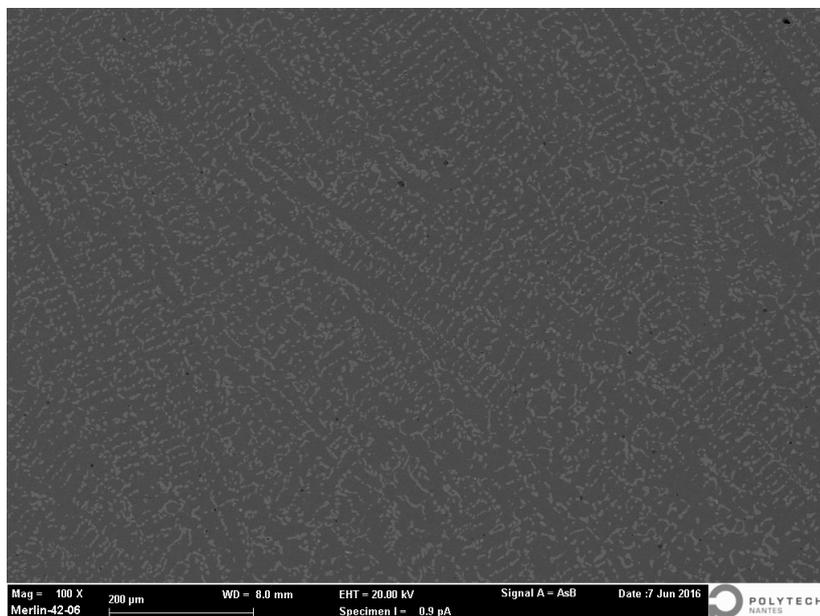


Figure 4.48 — Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CFC 3. Les zones noires sont des pores.

La composition réelle de l'alliage mesurée par EDS est 22Co-6Fe-32Mn-6Nb-34Ni, la composition nominale étant 22Co-6Fe-32Mn-5Nb-35Ni (en %_{at.}). Deux phases semblent coexister (figure 4.49) : une phase claire riche en niobium, en cobalt, en nickel et en manganèse, et une phase sombre riche en nickel, en manganèse et en cobalt.

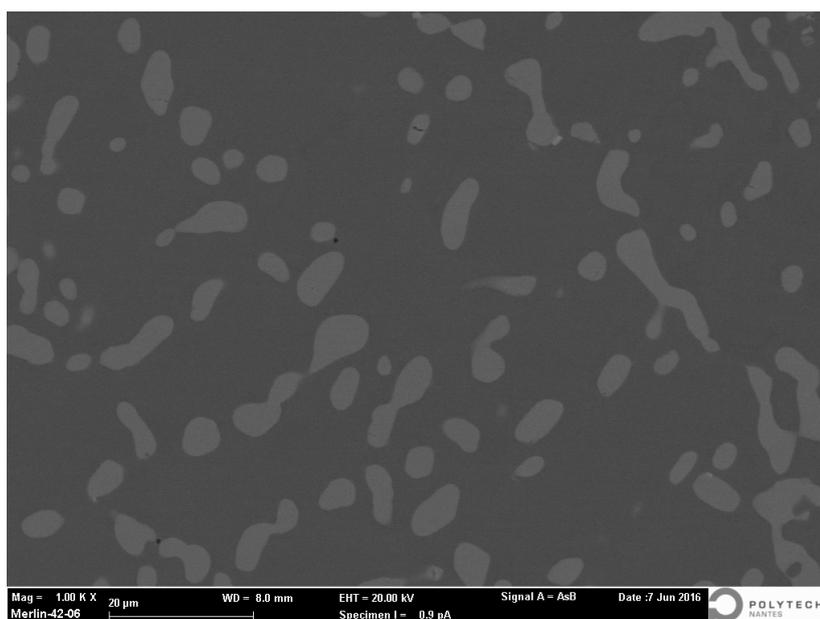


Figure 4.49 — Image en électrons rétrodiffusés de l'alliage HEA CFC 3. Les zones noires sont des pores.

La présence de plusieurs phases de structure différente est mise en évidence par la diffraction des rayons X (figure 4.50).

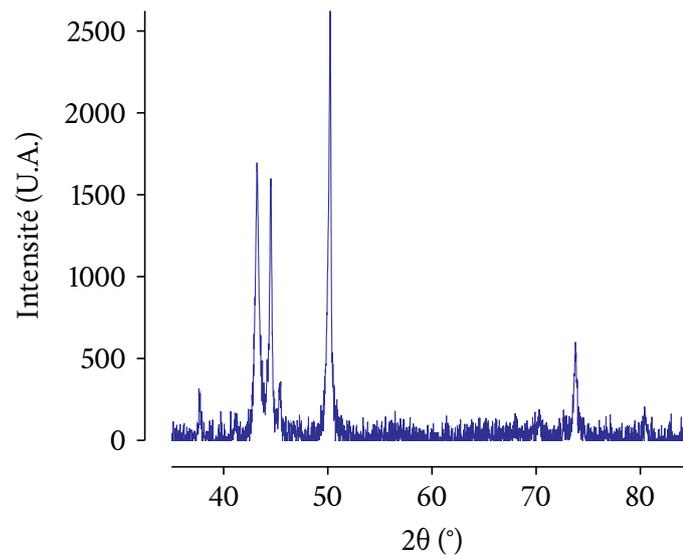


Figure 4.50 — Diffractogramme de l'alliage HEA CFC 3.

La microdureté de l'alliage HEA CFC 3 s'élève à $269 \pm 31 \text{ HV}_{0,5}$, soit $2,64 \pm 0,30 \text{ GPa}$.

4.6.8 Résumé des résultats

Le [tableau 4.7](#) résume les résultats expérimentaux obtenus. Un « Non » dans la colonne « monophasé » signifie que les observations expérimentales ont confirmé la présence de plusieurs phases. Dans le cas du HEA CFC 1, le caractère « monostructuré » observé par DRX doit être confirmé; dans celui du HEA CFC 2, plusieurs phases semblent adopter une structure proche (d'où les parenthèses).

TABLEAU 4.7 — Résumé des résultats préliminaires de la validation expérimentale conduite sur les alliages à forte entropie sélectionnés à l'issue des optimisations. *Cette mesure doit être confirmée.

Alliage	Composition réelle (% _{at})	Microdureté (GPa)	Monophasé	
			MEB	DRX
HEA CC 1	35Al - 45Cr - 3Mn - 9Ti - 8V	6,03 ± 0,71	Oui	Oui
HEA CC 2	31Al - 37Cr - 7Mn - 6Mo - 19Ti	6,45 ± 0,37	Oui	Oui
HEA CC 3	27Mo - 10Ta - 11Ti - 6V - 46Zr	7,03 ± 0,25	Non	Non
HEA CC 4	32Al - 36Cr - 7Mo - 14Ti - 6V - 6Zr	6,66 ± 0,44	Non	Non
HEA CFC 1	9Al - 17Co - 35Fe - 5Mo - 33Ni	1,78 ± 0,16	Oui	Oui*
HEA CFC 2	33Co - 9Fe - 21Mn - 28Ni - 9W	2,09 ± 0,25	Non	(Oui)
HEA CFC 3	22Co - 6Fe - 32Mn - 6Nb - 34Ni	2,64 ± 0,30	Non	Non

Sur les sept alliages fabriqués, trois sont en pratique monophasés. Les critères de stabilité de la solution solide sur lesquels reposent les optimisations, ainsi que les calculs thermodynamiques ayant aidé la sélection des alliages, sont ainsi mis en défaut pour cinq alliages.

Les valeurs des critères de conception recalculées pour les compositions réelles des alliages dont la constitution a été observée comme étant monophasée sont données dans le [tableau 4.8](#). Deux variations nettes sont à remarquer par rapport aux valeurs déterminées à partir des compositions nominales : (i) la valeur du critère P_{IF} de l'alliage HEA CFC 1 devient inférieure au seuil précédemment défini et (ii) la contribution de la solution solide au renforcement de l'alliage HEA CC 1 augmente de plus de 250 MPa.

TABLEAU 4.8 — Valeurs des critères de conception des alliages à forte entropie vérifiés expérimentalement, recalculées à partir de leur composition réelle, et mesures expérimentales de leur masse volumique et de leur limite d'élasticité. Les valeurs entre parenthèses ont été déterminées à partir des compositions nominales.

Alliage	Critères de conception			Mesures expérimentales	
	Critère P_{IF}	ρ (g.cm ⁻³)	CSSR (MPa)	ρ (g.cm ⁻³)	σ_y (MPa)
HEA CC 1	0,874 (0,845)	5,13 (5,12)	1361 (1103)	5,22	~2000
HEA CC 2	0,546 (0,549)	5,24 (5,10)	1383 (1316)	5,32	~2150
HEA CFC 1	0,302 (0,409)	7,84 (7,79)	734 (721)	7,83	~590

En utilisant la relation approximative entre limite d'élasticité σ_y et microdureté HV, $\sigma_y \approx HV/3$, il est possible d'estimer la limite d'élasticité des alliages HEA CC 1, HEA CC 2 et HEA CFC 1 ([tableau 4.8](#)). Dans le cas de l'alliage HEA CC 1, cette estimation de la limite d'élasticité est très supérieure à la CSSR prédite; inversement, pour l'alliage HEA CFC 1, la CSSR est surestimée. Le modèle de CSSR, même s'il a permis la conception d'alliages résistants, montre donc également ses limites. Néanmoins, le positionnement de ces alliages sur un diagramme d'Ashby²⁴⁶ représentant la limite d'élasticité (ou la résistance) des différentes catégories de matériaux connus en

fonction de leur masse volumique (figure 4.51) met en exergue les propriétés attrayantes des alliages fabriqués. Ces propriétés sont d'autant plus intéressantes qu'il s'agit d'alliages monophasés vraisemblablement constitués de grains millimétriques étant donné le mode de fabrication et le traitement thermique. Avec une masse volumique de $5,2\text{-}5,3\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, les alliages HEA CC 1 et HEA CC 2 pourraient combler le « trou » des alliages structuraux situé entre les alliages de titane ($\sim 4,4\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$) et les aciers ($\sim 7,8\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$) tout en possédant une limite d'élasticité voisine de 2000-2100 MPa, supérieure à celle de tous les alliages de titane connus.

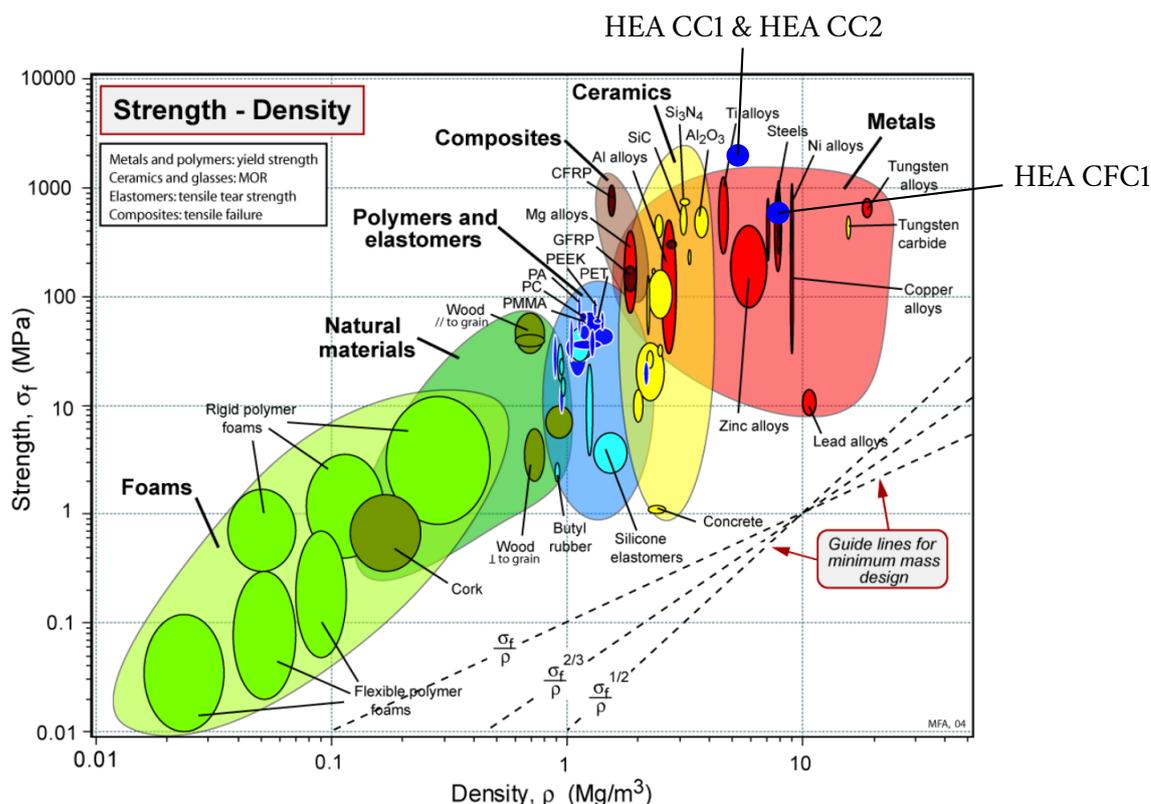


Figure 4.51 — Résistance de différentes familles de matériaux en fonction de leur masse volumique.²⁴⁶ Les alliages HEA CC 1 et HEA CFC 1 sont symbolisés par les points bleus en haut à droite. Le HEA CC 2 est quasiment confondu avec le HEA CC 1.

Toutefois, la forme et la taille des échantillons ne permet pas d'extraire des éprouvettes pour mesurer les propriétés mécaniques de manière conventionnelle et représentative de la microstructure; une fabrication à plus grande échelle d'alliages corroyés en vue de caractérisations plus poussées s'avère indispensable. Notamment, la mesure de la ductilité, qui n'est ici pas modélisée, compléterait avantageusement les caractérisations et permettrait de préciser le positionnement des alliages HEA CC 1, HEA CC 2 et HEA CFC 1 par rapport aux familles d'alliages existantes.

4.7 Synthèse

Un critère de conception récemment proposé, basé sur une combinaison de paramètres physico-chimiques et thermodynamiques, a été exploité afin de concevoir des alliages à forte entropie. Les optimisations conduites suivant ce critère, la contribution de la solution solide au durcissement et la masse volumique ont permis de définir plusieurs milliers d'alliages Pareto-optimaux. Ces alliages appartiennent à plusieurs familles différentes et présentent divers compromis entre résistance, masse volumique et stabilité constitutionnelle. L'approche CALPHAD couplée à quatre bases

de données thermodynamiques permet l'analyse des résultats sous l'angle thermodynamique. La constitution de la majeure partie des alliages optimaux est ainsi prédite homogène à au moins une température entre 700 °C et 1300 °C (sachant que les calculs sont espacés de 50 K).

Sept alliages ont été sélectionnés pour être fabriqués et caractérisés; parmi eux se trouvent quatre alliages de structure prédite cubique centrée et trois de structure cubique à faces centrées. Les résultats préliminaires des caractérisations montrent qu'au moins deux de ces alliages semblent être monophasés à la suite d'un traitement thermique d'homogénéisation inféré à l'aide de la méthode CALPHAD. Les propriétés de ces alliages sont attrayantes et motiveront leur caractérisation plus fine. Par ailleurs, un travail plus approfondi reste à accomplir concernant, entre autres, les températures du traitement d'homogénéisation des autres alliages.

Les premiers résultats expérimentaux montrent que les modèles exploités sont susceptibles de fournir des estimations inexactes, et illustrent le besoin de modèles plus performants tant pour décrire la stabilité d'une solution solide que pour prédire sa résistance. Notamment, la conception d'alliages a été faite en considérant simultanément tous les paramètres physicochimiques habituellement exploités pour guider la formation d'une solution solide, ainsi que la thermodynamique prédictive s'appuyant sur quatre bases de données. Malgré ces précautions, sur les sept alliages fabriqués seulement deux (voire trois) semblent monophasés. Ces résultats sont certes préliminaires et devront être approfondis, mais il semble d'ores et déjà possible de constater la limite des représentations physiques actuelles dans le cas des alliages multiconstituants fortement concentrés. Par ailleurs, l'établissement d'un modèle de ductilité, variable absente de ce travail, bénéficierait à l'approche de conception proposée en complétant les prédictions de résistance. L'augmentation de la ductilité *via* la minimisation de l'énergie de faute d'empilement,²⁴⁷ cette dernière pouvant être estimée par la méthode CALPHAD,^{248,249} fait partie des possibilités à explorer.

Références

48. YEh, J. W., CHEN, S. K., LIN, S. J., GAN, J. Y., CHIN, T. S., SHUN, T. T., TSAU, C. H. & CHANG, S. Y. [Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes](#), *Advanced Engineering Materials* **6** (5), 299–303 (2004), cf. pages 9, 147, 148, 154, 160.
49. TSAI, M.-H. & YEh, J.-W. [High-Entropy Alloys: A Critical Review](#), *Materials Research Letters* **2** (3), 107–123 (2014), cf. pages 9, 148.
50. MIRACLE, D. B., MILLER, J. D., SENKOV, O. N., WOODWARD, C., UCHIC, M. D. & TILEY, J. [Exploration and development of high entropy alloys for structural applications](#), *Entropy* **16** (1), 494–525 (2014), cf. pages 9, 22, 157.
79. GAO, M. & ALMAN, D. [Searching for Next Single-Phase High-Entropy Alloy Compositions](#), *Entropy* **15** (10), 4504–4519 (2013), cf. pages 21, 157.
81. ZHANG, F., ZHANG, C., CHEN, S. L., ZHU, J., CAO, W. S. & KATTNER, U. R. [An understanding of high entropy alloys from phase diagram calculations](#), *Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* **45**, 1–10 (2014), cf. pages 22, 156.
85. *Thermo-Calc Software TCNI7 Ni-based Superalloys Database version 7*. En ligne : www.thermocalc.com/media/23655/dbd_tcni7_extended_info.pdf (visité le 06/05/2016), cf. pages 22, 157.
86. *Thermotech TTNI8 Ni-based Superalloys Database version 8*. En ligne : http://www.thermocalc.com/media/5980/dbd_ttni8_bh.pdf (visité le 06/05/2016), cf. pages 22, 157.

87. *Thermo-Calc Software TCFE8 Steels and Fe-alloys database version 8*. En ligne : http://www.thermocalc.com/media/10306/dbd_tcf8_extendedinfo.pdf (visité le 21/08/2016), cf. pages 22, 157.
88. *Scientific Group Thermodata Europe Solutions Database version 5*. En ligne : www.thermocalc.com/media/8160/ssol5_extended_info-2.pdf (visité le 06/05/2016), cf. pages 23, 157.
144. THE MATHWORKS INC. MATLAB 2013b. Natick, MA (2013), cf. pages 36, 161.
208. GOEL, T. & STANDER, N. *A study on the convergence of multiobjective evolutionary algorithms*, Preprint submitted to the 13th AIAA/ISSMO conference on Multidisciplinary Analysis Optimization (2010), cf. pages 102, 162.
217. VARALAKSHMI, S., KAMARAJ, M. & MURTY, B. S. *Processing and properties of nanocrystalline CuNiCoZnAlTi high entropy alloys by mechanical alloying*, *Materials Science and Engineering A* **527** (4–5), 1027–1030 (2010), cf. page 147.
218. CANTOR, B., CHANG, I. T. H., KNIGHT, P. & VINCENT, A. J. B. *Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys*, *Materials Science and Engineering A* **375–377**, 213–218 (2004), cf. page 147.
219. VINCENT, A. J. B. *A study of three multicomponent alloys*, thèse de licence, University of Sussex (1981), cf. page 147.
220. HUANG, K. H. *A study on multicomponent alloy systems containing equal-mole elements*, thèse de master, National Tsing Hua University (1996), cf. page 147.
221. ZHANG, Y., ZHOU, Y. J., LIN, J. P., CHEN, G. L. & LIAW, P. K. *Solid-solution phase formation rules for multi-component alloys*, *Advanced Engineering Materials* **10** (6), 534–538 (2008), cf. pages 148–150, 152, 154.
222. PICKERING, E. J. & JONES, N. G. *High-entropy alloys: a critical assessment of their founding principles and future prospects*, *International Materials Reviews* **61** (3), 183–202 (2016), cf. page 148.
223. HUME-ROTHERY, W. *Atomic Theory for Students of Metallurgy* — 5th reprint, The Institute of Metals, London (1969), ISBN : 978-0-901462-39-8, cf. page 149.
224. FANG, S., XIAO, X., XIA, L., LI, W. & DONG, Y. *Relationship between the widths of super-cooled liquid regions and bond parameters of Mg-based bulk metallic glasses*, *Journal of Non-Crystalline Solids* **321** (1-2), 120–125 (2003), cf. page 149.
225. GUO, S. & LIU, C. T. *Phase stability in high entropy alloys: Formation of solid-solution phase or amorphous phase*, *Progress in Natural Science: Materials International* **21** (6), 433–446 (2011), cf. pages 149, 150, 152–154.
226. GUO, S., NG, C., LU, J. & LIU, C. T. *Effect of valence electron concentration on stability of fcc or bcc phase in high entropy alloys*, *Journal of Applied Physics* **109** (10) (2011), cf. pages 150, 152.
227. POLETTI, M. G. & BATTEZZATI, L. *Electronic and thermodynamic criteria for the occurrence of high entropy alloys in metallic systems*, *Acta Materialia* **75**, 297–306 (2014), cf. pages 150–154.
228. MIZUTANI, U. *Hume-Rothery Rules for Structurally Complex Alloy Phases*, CRC Press, Boca Raton, FL (2010), ISBN : 978-1-4200-9058-1, cf. page 150.

229. YEH, J. W., LIN, S. J., CHIN, T. S., GAN, J. Y., CHEN, S. K., SHUN, T. T., TSAU, C. H. & CHOU, S. Y. Formation of simple crystal structures in Cu-Co-Ni-Cr-Al-Fe-Ti-V alloys with multiprincipal metallic elements, *Metallurgical and Materials Transactions A* **35** (8), 2533–2536 (2004), cf. page 150.
230. MIEDEMA, A. R., de CHÂTEL, P. F. & de BOER, F. R. Cohesion in alloys — fundamentals of a semi-empirical model, *Physica* **100** (1), 1–28 (1980), cf. page 150.
231. YANG, X. & ZHANG, Y. Prediction of high-entropy stabilized solid-solution in multi-component alloys, *Materials Chemistry and Physics* **132** (2–3), 233–238 (2012), cf. pages 151, 154.
232. TODA-CARABALLO, I. & RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. A criterion for the formation of high entropy alloys based on lattice distortion, *Intermetallics* **71**, 76–87 (2016), cf. pages 151–154, 156, 157, 159–161, 171, 178.
233. ASENSIO DOMÍNGUEZ, L., GOODALL, R. & TODD, I. Prediction and validation of quaternary high entropy alloys using statistical approaches, *Materials Science and Technology* **31** (10), 1201–1206 (2015), cf. page 153.
234. TODA-CARABELLO, I. Designing high entropy alloys employing thermodynamics and Gaussian process statistical analysis. Travail non-publié (2016), cf. page 155.
235. TANCRET, F. Designing high entropy alloys employing thermodynamics and Gaussian process statistical analysis. Travail non-publié (2016), cf. pages 155–158.
236. ZHANG, C., ZHANG, F., CHEN, S. & CAO, W. Computational thermodynamics aided high-entropy alloy design, *Journal of Materials* **64** (7), 839–845 (2012), cf. page 157.
237. RAGHAVAN, R., HARI KUMAR, K. C. & MURTY, B. S. Analysis of phase formation in multi-component alloys, *Journal of Alloys and Compounds* **544**, 152–158 (2012), cf. page 157.
238. PanHEA — Thermodynamic database for multi-component high entropy alloys. En ligne : <http://www.computherm.com/download/database2016/PanHEA.pdf> (visité le 22/07/2016), cf. page 157.
239. Thermo-Calc Software TCHEA High Entropy Alloy Database version 1.0. En ligne : http://www.thermocalc.com/media/35873/tchea10_extended_info_bh.pdf (visité le 06/05/2016), cf. page 157.
240. TODA-CARABALLO, I. & RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. Modelling solid solution hardening in high entropy alloys, *Acta Materialia* **85**, 14–23 (2015), cf. page 160.
241. FRIEDRICH, T. & WAGNER, M. Seeding the initial population of multi-objective evolutionary algorithms: A computational study, *Applied Soft Computing Journal* **33**, 223–230 (2015), cf. page 161.
242. DEB, K. A Robust Evolutionary Framework for Multi-Objective Optimization, *Proceedings of the 10th annual conference on genetic and evolutionary computation — GECCO’08*, 633–640, Association for Computing Machinery, New York, NY (2008), cf. page 162.
243. DREWES, R., LOUIS, S., MILES, C., MCDONNELL, J. & GIZZI, N. Use of case injection to bias genetic algorithm solutions of similar problems, *The 2003 Congress on Evolutionary Computation — CEC’03*, Institute of Electrical & Electronics Engineers (IEEE), New York City, NY (2003), cf. page 165.
244. HORNBY, G. S. ALPS: The Age-Layered Population Structure for Reducing the Problem of Premature Convergence, *Proceedings of the 8th annual conference on genetic and evolutionary computation — GECCO’06*, Association for Computing Machinery (ACM) (2006), cf. page 165.

245. FRACZKIEWICZ, A. Metal alloy used to make metal part, comprises chromium, nickel, manganese, cobalt, iron and optionally secondary components, Brevet FR 3 026 748-A1. (2016), cf. page 177.
246. ASHBY, M. [Materials Selection in Mechanical Design, Fourth Edition](#), Butterworth-Heinemann, Oxford, United Kingdom (2010), ISBN : 978-1-85617-663-7, cf. pages 199, 200.
247. GAO, M. C., YEH, J. W., LIAW, P. K. & ZHANG, Y. [High-Entropy Alloys: Fundamentals and Applications](#), Springer International Publishing (2016), ISBN : 978-3-319-27011-1, cf. page 201.
248. OLSON, G. B. & COHEN, M. [A general mechanism of martensitic nucleation: Part I. General concepts and the FCC → HCP transformation](#), *Metallurgical Transactions A* 7, 1897–1904 (1976), cf. page 201.
249. MIODOWNIK, A. P. [The calculation of stacking fault energies in Fe-Ni-Cr alloys](#), *Calphad* 2, 207–226 (1978), cf. page 201.

Conclusions et perspectives 5

Les besoins en matériaux performants des secteurs aéronautique et énergétique continuent de motiver le développement de nouveaux alliages métalliques : aciers spéciaux, alliages de titane, superalliages à base de nickel ou de cobalt, etc. Le respect de cahiers des charges contraignants implique la complexification de la composition de ces alliages dont les nombreux éléments d'addition contribuent à supporter des chargements mécaniques à plus ou moins longs termes dans des environnements agressifs (hautes températures, corrosion...). La technicité croissante de ces alliages rend leur conception ardue : la dizaine d'éléments d'addition complique la description des relations entre composition, microstructure et propriétés tout en empêchant le parcours complet (expérimental et analytique) de l'espace des compositions possibles de par sa taille gigantesque. Depuis une vingtaine d'années, le recours à un certain nombre d'outils informatiques a permis de passer outre une partie de ces limitations *via*, entre autres, des méthodes d'exploration intelligente de l'espace des possibles et des modèles de thermodynamique prédictive et de fouille de données.

La présente étude approfondit les travaux existants dans le domaine de la conception d'alliages assistée par ordinateur, en proposant — et c'est son principal résultat — une méthode de conception associant une métaheuristique avec des outils de thermodynamique prédictive et de fouille de données. L'optimisation repose sur la définition et l'intégration d'un grand nombre de critères physicochimiques et thermodynamiques ainsi que l'extension des bases de données d'apprentissage. Universelle, cette méthode offre la possibilité d'optimiser la composition d'alliages de familles différentes.

S'appuyant largement sur les données expérimentales disponibles, la méthode a pour visée une réduction des temps de développement de nouveaux alliages *via* l'économie des prototypages inhérents à l'approche essai-erreur. Cette méthode informatique se démarque également des systèmes exploitant une métaheuristique par le degré d'intégration des outils prédictifs et le recours à un paradigme multiobjectifs. De plus, les outils de prédictions choisis rendent la méthode plus rapide que des systèmes similaires basés sur des techniques chronophages telles la DFT et la MD.

La composition des superalliages optimisés est en accord avec les connaissances métallurgiques actuelles, par exemple celles concernant les phénomènes de renforcement. En outre, l'utilisation de la méthode de conception a permis d'illustrer la marge d'optimisation existante pour les superalliages à base de nickel. En effet, un nombre important des alliages optimisés devraient être, selon les prédictions des modèles, plus performants que des alliages commerciaux développés récemment et incarnant « l'état de l'art ». Des alliages présentant de meilleurs ratios propriétés/coût ont ainsi été isolés dans l'espace du brevet de l'AD730. Pareillement, l'optimisation de superalliages destinés aux centrales thermiques a conduit à la découverte d'alliages supérieurs à l'Inconel 740H et au Haynes 282, deux superalliages de dernière génération. Les alliages optimisés respectent un

nombre important de contraintes thermodynamiques qui devraient leur assurer la longévité nécessaire en service. De plus, les compositions proposées sont assez « robustes », en cela que de faibles variations de composition n'invalident pas les contraintes de constitution. Les premiers résultats de la validation expérimentale confirment en premier lieu les prédictions de la thermodynamique sur la constitution de quelques uns des alliages proposés. Ce travail a également illustré l'intérêt de l'analyse décisionnelle pour extraire des compromis selon un grand nombre de critères parmi plusieurs milliers de candidats et selon une méthodologie plus stricte que la seule pensée humaine subjective.

Appliquée à la conception d'alliages dits « à forte entropie », la méthode s'est révélée capable d'explorer plusieurs dizaines de familles différentes et de quantifier leur « potentiel » grâce à l'intégration d'un nouveau critère physicochimique et statistique. À ce large spectre de compositions correspondent des compromis résistance/masse volumique variés, parmi lesquels sept alliages ont été sélectionnés. Leur caractérisation préliminaire a montré qu'au moins deux (voire trois) d'entre eux sont monophasés; deux présentent en plus un ratio résistance/dureté inédit.

Les optimisations conduites dans ce travail ont mené à la découverte d'un certain nombre d'alliages novateurs. L'optimalité de ces alliages — au sens mathématique du terme, c'est-à-dire leur appartenance à l'ensemble de Pareto réel — est difficile à confirmer. Comme de nombreux problèmes réels, l'optimisation de leur composition est en effet conduite « en aveugle », c'est-à-dire sans connaissance du vrai ensemble de Pareto. En conséquence, l'application des métriques d'optimalité pouvant guider l'optimisation, comme par exemple l'hypervolume, est ardue puisque la définition de points de référence adaptés, fournissant une information objective quant à la convergence de l'optimisation, est quasiment impossible.²⁵⁰ De plus, la non-différentiabilité des fonctions optimisées (propriétés thermomécaniques et thermochimiques) signifie que les conditions mathématiques d'optimalité de Karush, Kuhn et Tucker (conditions KKT)^{251,252} ne sont pas facilement calculables.

S'il est possible que la marge d'amélioration des propriétés n'ait ainsi pas été exploitée au mieux, et que les alliages conçus soient sous-optimaux au regard du vrai ensemble de Pareto, il reste que les alliages découverts présentent des propriétés prédites attrayantes, inédites ou supérieures à celles d'alliages commerciaux récents. D'un point de vue « ingénierie », la méthode de conception proposée semble donc tout à fait pertinente.

L'exploitation de la marge d'amélioration existante dans l'immense espace des compositions pourrait être conduite par un algorithme dédié à l'optimisation à maints objectifs. Certains de ces algorithmes s'appuient sur une redéfinition du concept d'optimalité (et donc de domination), par exemple en prenant en compte le nombre d'objectifs améliorés (comme la *k*-optimalité).²¹⁰

Malgré les difficultés évoquées, il est certain que l'approche proposée ouvre une piste qui peut être poursuivie et approfondie de diverses manières, à l'instar de chercheurs proposant de conserver la Pareto-optimalité mais usant d'opérateurs de diversité différents : par exemple, des points de référence dans NSGA-III²⁵³ ou une discrimination par grille dans GrEA (*Grid-Based Evolutionary Algorithm*)²⁵⁴ à la place de la distance de peuplement de NSGA-II.

Parmi les autres extensions possibles de ce travail se trouve le coapprentissage. Les différentes propriétés thermomécaniques optimisées dans ce travail (limite d'élasticité, résistance à la traction, contrainte de rupture par fluage) sont en effet fortement corrélées. Leur apprentissage simultané serait ainsi d'intérêt en vue d'obtenir un système prédictif complet et pouvant profiter des informations provenant de toutes les bases de données. Un tel système serait également capable de gérer des données incomplètes en extrayant les informations des seules données disponibles. Les réseaux bayésiens sont une représentation possible d'un tel système; l'intégration en leur sein de

processus gaussiens permettrait la modélisation de propriétés non-linéaires.²⁵⁵ La faisabilité des réseaux bayésiens en métallurgie a été illustrée par Nieves *et al.*²⁵⁶ qui les ont employés pour estimer la résistance à la traction d'alliages moulés.

Sur le plan « métallurgique », plusieurs extensions du présent travail sont également envisageables.

La méthode d'optimisation proposée est universelle en cela qu'elle n'est pas liée à une famille d'alliages particulière et n'est pas limitée par la nature des critères d'optimisation. Ainsi, elle peut servir à l'optimisation de la composition d'aciers spéciaux, d'aciers inoxydables, d'alliages d'aluminium, de cobalt, de magnésium, de nickel ou de titane, selon des critères permettant leur conception « sur mesure » en vue d'applications particulières : résistance aux chocs, à certaines formes de corrosion, aux irradiations, à l'abrasion...

Dans le cas des superalliages, les optimisations effectuées dans ce travail reposent sur un critère de résistance à l'oxydation et à la corrosion simpliste (la teneur en chrome libre dans la matrice austénitique). Ce critère ne fournit qu'une vision incomplète de la résistance d'un alliage, ne prenant notamment pas en compte les cinétiques d'oxydation. D'autres critères plus représentatifs de la résistance globale à la corrosion pourraient être exploités, tel le critère de Wagner.²⁵⁷ Ce critère permet entre autres d'estimer le mode d'oxydation : celui-ci peut être externe, auquel cas les éléments réactifs tels le chrome et l'aluminium diffusent vers la surface de l'alliage pour former une couche passivante, soit interne, auquel cas les espèces oxydantes pénètrent à l'intérieur du matériau et réagissent localement avec des éléments d'alliage (aluminium, titane, fer). L'oxydation interne est problématique car elle consomme certains éléments renforçants de la matrice en profondeur, qui ne participent alors plus à la formation d'une couche de passivation continue; elle conduit par ailleurs à la formation, à l'intérieur du matériau, d'oxydes fragiles et donc délétères. Dans la pratique, le critère de Wagner se calcule sur la base des solubilités et diffusivités des éléments oxydants et réactifs, des quantités rapidement évaluées par la méthode CALPHAD.

Des modèles de métallurgie physique simulant la croissance de la couche de passivation, tel celui de Bensch *et al.*,²⁵⁸ pourraient également être exploités dans une optimisation. Basé notamment sur le calcul de l'activité de l'aluminium, le modèle sus-cité permet la détermination de l'évolution de la sous-surface de superalliages alumino-formeurs au cours de l'oxydation. La prédiction de la consommation des éléments d'alliages sous la surface du métal, et donc de la dégradation de certaines propriétés (chimiques, mécaniques) devient ainsi possible. Cependant, l'établissement même d'un tel modèle demeure la principale difficulté de cette voie, au vu des très nombreux phénomènes et interactions à prendre en compte.

L'optimisation de la résistance à l'oxydation pourrait également s'appuyer sur des grandeurs synthétisant la cinétique d'oxydation. La minimisation de la constante parabolique d'oxydation k_p serait un moyen indirect d'assurer cette résistance en ralentissant les phénomènes (diffusionnels) de perte ou de gain de masse. Une des difficultés de cette approche réside dans l'impossibilité actuelle de déterminer la grandeur k_p sans mesure expérimentale. Afin de combler cette limitation, une partie de ce travail de thèse a porté sur le regroupement, par l'expérience, de constantes paraboliques d'oxydation. Menées sur une vingtaine de superalliages à base de nickel (dont la moitié fournie par Aubert & Duval), des expériences d'oxydation isotherme ont permis d'amorcer la constitution d'une base de données devant servir, à terme, à relier la composition d'un alliage à sa constante parabolique à l'aide, par exemple, de processus gaussiens. Un tel modèle permettrait l'intégration de cette constante dans les optimisations, qui complèterait alors le critère portant sur le chrome libre.

En outre, cette approche pourrait être étendue en faisant usage du modèle P- k_p développé par Poquillon et Monceau,²⁵⁹ qui a notamment pour avantage la prise en compte de l'effet de cycles

thermiques d'oxydation. Identiquement, l'exploitation de ce critère est conditionnée par l'agrégation de données sur un maximum d'alliages existants afin d'extrapoler à des alliages inédits.

Néanmoins, en conservant les critères de résistance à l'oxydation actuels, la méthode développée dans ce travail devrait être en mesure d'optimiser la composition de superalliages actuellement peu représentés sur le marché : les superalliages à base de nickel polycristallins corroyés, renforcés par précipitation de la phase γ' et alumino-formeurs. L'avantage de ces alliages est leur capacité à former une couche de passivation d'alumine, indispensable à des températures supérieures à 950 °C au-delà de laquelle la chromine se décompose. Le cahier des charges d'une telle optimisation contient des termes plus antagonistes que dans le cas des alliages chromino-formeurs : en effet, une part suffisante d'aluminium doit demeurer en solution dans la matrice, tandis qu'une autre doit contribuer à la formation de la principale et essentielle phase renforçante (γ'). La quantité d'aluminium nécessaire à la formation d'une couche de passivation continue dépend de la composition globale. Pour des alliages Ni-Al, cette quantité s'élève à environ 6 %_{at.} en solution dans la matrice (γ). Il semble cependant qu'une teneur de 20 %_{at.} de chrome en solution dans la matrice abaisse cette teneur aux alentours de 4 %_{at.} (cf. alliages commerciaux Haynes 214 et Haynes HR-224), ce qui rend possible le respect des conditions de fabricabilité en limitant l'ajout d'aluminium et donc la formation en excès de la phase γ' .

Un autre cas de conception de superalliages pouvant profiter de la méthode proposée concerne l'optimisation de la résistance à la fragilisation par l'hydrogène. L'exposition des superalliages à l'hydrogène, notamment dans les industries pétrochimique et nucléaire, conduit à la fragilisation de leur structure. La constitution des superalliages est déterminante dans la résistance à cette fragilisation. Les carbures MC (en particulier ceux riches en vanadium) semblent jouer le rôle bénéfique de « puits à hydrogène », tout comme la phase γ' présentant un fort désaccord paramétrique avec la matrice (γ). D'autres phases (γ'' et δ , carbures $M_{23}C_6$) semblent au contraire délétères. Dans ce contexte, une des difficultés de l'optimisation réside dans l'obtention de propriétés mécaniques correctes avec une microstructure qui leur est presque défavorable : par exemple, un grand désaccord paramétrique tend à dégrader la tenue au fluage, tandis que l'ajout de chrome (pour la résistance générale à la corrosion) peut provoquer la formation de carbures $M_{23}C_6$ indésirables. Une étude portant sur ce cahier des charges est actuellement en cours, en partenariat avec l'université de Cambridge.

La forgeabilité des superalliages est un point peu discuté dans ce travail ; cet aspect est actuellement en cours d'approfondissement dans le cadre d'une autre collaboration avec l'université de Cambridge. Ce nouveau travail consiste en l'optimisation de la capacité de recristallisation dynamique. Celle-ci caractérise la « facilité » avec laquelle est opéré l'affinement des grains au cours d'opérations de forgeage. La capacité de recristallisation d'un alliage dépend notamment de sa composition, de sa constitution et des paramètres de forgeage (temps, température, vitesse de déformation). L'approche proposée consiste à optimiser ces trois facteurs concomitamment, tout en assurant la performance des alliages *via* le respect des contraintes thermodynamiques de stabilité. Cette optimisation repose sur l'utilisation d'un modèle de métallurgie physique récemment développé⁷⁸ prenant en compte (par l'intermédiaire de CALPHAD) l'épinglage des joints de grains par les précipités de phase γ' et les carbures $M_{23}C_6$, ainsi que le traînage des solutés par les joints. Le modèle permet de contrôler, en fonction de la composition et des paramètres de forgeage, la taille des grains finale et la déformation nécessaire pour atteindre une recristallisation complète. À la clef d'une telle optimisation se trouvent des superalliages dont la composition même a été conçue sur mesure pour une opération de forgeage précise garantissant l'obtention d'une microstructure adaptée aux conditions de service prévues (par exemple des gros grains pour améliorer la résistance au fluage, ou des grains fins pour une meilleure résistance en traction).

D'autres cahiers aux charges antagonistes sont imaginables, comme par exemple la maximisation de la concentration en fer dans les superalliages à base de nickel (réduisant leur coût); au-delà de 25 %_{mass.}, cette augmentation tend à inhiber la formation de la phase durcissante γ' ,³⁷ ce qui constitue un évident problème pour la conservation d'une bonne tenue mécanique. Il existe peut-être, dans l'immense espace des possibles, un domaine de compositions réconciliant ces deux objectifs et qu'une métaheuristique découvrirait.

Parmi les autres familles d'alliages pouvant profiter de la méthode d'optimisation proposée se trouvent les alliages dont les propriétés dépendent d'une transformation allotropique particulière (alliages TRIP, alliages superélastiques ou alliages à mémoire de forme) ou les alliages TWIP (*T*Wining-*I*nduced *P*lasticity). L'optimisation de la composition de tels alliages nécessite l'établissement de critères reliant celle-ci à l'existence d'une transformation martensitique et à des modèles de ductilité pouvant par exemple reposer sur des processus gaussiens, ainsi qu'un moyen d'accéder à l'énergie de fautes d'empilement — la méthode CALPHAD permet le calcul de cette dernière.

Par extension, les alliages à forte entropie bénéficieraient fortement des modèles sus-cités, notamment d'un modèle de ductilité en mesure de compléter les prédictions de résistance. Par ailleurs, les alliages à forte entropie représentent un chemin possible vers de nouveaux alliages à mémoire de forme.²⁶⁰

En outre, la modélisation des propriétés à chaud des alliages à forte entropie (caractéristiques mécaniques, résistance à la corrosion) déverrouillerait des cas d'optimisation plus proches d'applications potentielles. Un travail expérimental conséquent sera cependant nécessaire pour atteindre cet objectif. La conception de « superalliages à forte entropie^{80,261} » profiterait d'un tel travail en palliant aux manques des bases de données thermodynamiques et thermophysiques. Il est intéressant de constater que si la philosophie de conception de ces superalliages diffère, elle résulte néanmoins en une constitution proche de celle des superalliages conçus dans la première partie de ce travail.

Dans la pratique, la viabilité de la fabrication d'alliages à l'échelle industrielle suppose la disponibilité des éléments d'addition nécessaires. Hors la France est majoritairement importatrice de minerais²⁶²; cette disponibilité est donc dépendante du bon-vouloir des pays exportateurs. La situation dans certains de ces pays a conduit l'Union Européenne à établir une liste « d'éléments critiques » dont l'approvisionnement est, ou risque de devenir, incertain.²⁶³ Dans cette liste apparaissent notamment le chrome, le cobalt, le niobium et le tungstène. À partir de cette criticité individuelle d'approvisionnement pourrait être calculée la « criticité globale » d'un alliage; la considération de ce nouveau critère reviendrait à inclure dans les optimisations une notion de « coût géopolitique » en sus du simple coût économique.

Enfin, à l'heure où le respect de l'environnement et le recyclage prennent une place de plus en plus prépondérante dans le développement de nouveaux matériaux, la prise en compte de nouveaux critères « écologiques » dès la conception d'alliages métalliques apparaît pertinente. En se basant sur le « coût carbone » des éléments d'addition, incluant notamment l'influence de leur extraction, il deviendrait possible de définir le coût carbone (ou coût environnemental) d'un alliage et de l'optimiser, au même titre que le coût économique et que les propriétés mécaniques. Cette approche est quelque peu limitée par la faible disponibilité des données nécessaires, mais constitue une extension séduisante du présent travail. L'optimisation de la composition d'alliages pourrait également être conduite à partir d'alliages recyclés, en remplaçant les éléments d'alliages purs par différents alliages commerciaux. L'optimisation porterait alors notamment sur les poids à conférer à chacun de ces alliages afin de (re)créer des alliages performants à coûts réduits.

Les nombreuses perspectives précitées illustrent la richesse des possibilités d'innovation demeurant dans les seuls domaines de la métallurgie classique — celle des alliages à composant principal unique : aluminium, cobalt, cuivre, fer, manganèse, nickel, titane... Cette richesse est double : les progrès de la métallurgie théorique assurent un apport continu en critères de conception dont l'optimisation se joue dans les titanesques espaces de compositions concevables. À ces possibilités loin d'être épuisées s'adjoignent celles offertes par le paradigme des alliages à composants principaux multiples qui, s'il n'est pas guidé par la seule entropie, oriente la création d'alliages vers de nouvelles voies prometteuses.

Références

37. TANCRET, F. [Computational thermodynamics and genetic algorithms to design affordable \$\gamma'\$ -strengthened nickel–iron based superalloys](#), *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **20** (4) N°045012 (2012), cf. pages 8, 21, 35, 42, 209.
78. TANCRET, F., GALINDO-NAVA, E. & RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. [Dynamic recrystallisation model in precipitation-hardened superalloys as a tool for the joint design of alloys and forming processes](#), *Materials & Design* **103**, 293–299 (2016), cf. pages 21, 208.
80. YEH, A. C., TSAO, T. K., CHANG, Y. J., CHANG, K. C., YEH, J. W., CHIOU, M. S., JIAN, S. R., KUO, C. M., WANG, W. R. & MURAKAMI, H. [Developing New Type of High Temperature Alloys — High Entropy Superalloys](#), *International Journal of Metallurgical & Materials Engineering* **1** (107), 1–4 (2015), cf. pages 22, 209.
210. FARINA, M. & AMATO, P. [On the optimal solution for many-criteria optimization problems](#), *Proceedings of the 2002 Annual Meeting of the North American Fuzzy Information Processing Society NAFIPS-FLINT 2002*, 233–238, Institute of Electrical & Electronics Engineers (2002), cf. pages 123, 206.
250. ISHIBUCHI, H., MASUDA, H., TANIGAKI, Y. & NOJIMA, Y. [Difficulties in specifying reference points to calculate the inverted generational distance for many-objective optimization problems](#), *2014 IEEE Symposium on Computational Intelligence in Multi-Criteria Decision-Making (MCDM)*, Institute of Electrical & Electronics Engineers (IEEE), New York City, NY (2014), cf. page 206.
251. KARUSH, W. [Minima of Functions of Several Variables with Inequalities as Side Constraints](#), thèse de master, Department of Mathematics, University of Chicago (1939), cf. page 206.
252. KUHN, H. W. & TUCKER, A. W. [Nonlinear Programming](#), *Proceedings of the Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, 481–492, University of California Press, Berkeley, CA (1951), cf. page 206.
253. DEB, K. & JAIN, H. [An Evolutionary Many-Objective Optimization Algorithm Using Reference-Point-Based Nondominated Sorting Approach, Part I: Solving Problems With Box Constraints](#), *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **18**, 577–601 (2014), cf. page 206.
254. YANG, S., LI, M., LIU, X. & ZHENG, J. [A Grid-Based Evolutionary Algorithm for Many-Objective Optimization](#), *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **17**, 721–736 (2013), cf. page 206.
255. FRIEDMAN, N. & NACHMAN, I. [Gaussian process networks](#), *Proceedings of the Sixteenth conference on Uncertainty in artificial intelligence*, 211–219, Morgan Kaufmann Publishers Inc., Burlington, MA (2000), cf. page 207.

256. NIEVES, J., SANTOS, I., PENYA, Y. K., ROJAS, S., SALAZAR, M. & BRINGAS, P. G. **Mechanical Properties Prediction in High-Precision Foundry Production**, *Proceedings of the 7th IEEE International Conference on Industrial Informatics (INDIN)*, 31–36, Institute of Electrical & Electronics Engineers, New York City, NY (2009), cf. page 207.
257. WAGNER, C. **Reaktionstypen bei der Oxydation von Legierungen**, *Zeitschrift für Elektrochemie* **63** (7), 772–782 (1959), cf. page 207.
258. BENSCH, M., SATO, A., WARNKEN, N., AFFELDT, E., REED, R. C. & GLATZEL, U. **Modelling of High Temperature Oxidation of Alumina-Forming Single-Crystal Nickel-Base Superalloys**, *Acta Materialia* **60**, 5468–5480 (2012), cf. page 207.
259. POQUILLON, D. & MONCEAU, D. **Application of a Simple Statistical Spalling Model for the Analysis of High-Temperature, Cyclic-Oxidation Kinetics Data**, *Oxidation of Metals* **59**, 409–431 (2003), cf. page 207.
260. FIRSTOV, G., KOSORUKOVA, T., KOVAL, Y. & ODNOSUM, V. **High Entropy Shape Memory Alloys**, *Materials Today : Proceedings* **2**, S499–S503 (2015), cf. page 209.
261. HE, J. Y., WANG, H., HUANG, H. L., XU, X. D., CHEN, M. W., WU, Y., LIU, X. J., NIEH, T. G., AN, K. & LU, Z. P. **A precipitation-hardened high-entropy alloy with outstanding tensile properties**, *Acta Materialia* **102**, 187–196 (2016), cf. page 209.
262. Le chiffre du commerce extérieur — Direction générale des douanes. En ligne : <http://lekiosque.finances.gouv.fr/> (visité le 23/08/2016), cf. page 209.
263. Report on critical raw materials for the EU. Report of the *Ad hoc* Working Group on defining critical raw materials. En ligne : <http://ec.europa.eu/DocsRoom/documents/10010/attachments/1/translations/en/renditions/pdf> (visité le 23/08/2016) (Commission Européenne, 2014) cf. page 209.

Base de données d'apprentissage A

Le [tableau A.1](#) regroupe la dénomination et la composition des alliages présents dans les bases de données de la résistance à la traction, de la limite d'élasticité et de la contrainte de rupture par fluage. Les compositions nominales (en %_{mass.}) sont moyennées dans le domaine donné par la source. Les données proviennent :

- de la littérature technique, c'est-à-dire des fiches des fabricants (Special Metals, Haynes, Carpenter, ThyssenKrupp VDM, Aubert & Duval et Rolled Alloys);
- des catalogues de référence de la société américaine des métaux (*ASM Handbooks*);
- du site Matweb (<http://www.matweb.com/>), fournissant parfois des données pour des alliages ne figurant plus dans les catalogues des fabricants;
- de la littérature académique.

TABLEAU A.1 — Liste des alliages des bases de données de propriétés thermomécaniques. Compositions nominales moyennes en %_{mass.} — Sources : littérature technique | * ASM Handbooks | ** Matweb | *** autre source (littérature académique)

Dénomination	Ni	Cr	Co	Mo	W	Nb	Al	Ti	Fe	Mn	Si	C	Cu
Données originelles (Special Metals)													
	62,35	22,03	—	8,94	—	3,48	0,14	0,22	2,45	0,06	0,27	0,02	0,03
	62,02	22,12	—	9,08	—	3,68	0,17	0,18	2,44	0,03	0,23	0,02	0,02
	61,23	22,95	—	9,15	—	4,21	0,23	0,29	1,59	0,1	0,2	0,02	0,02
	61,67	21,92	—	8,98	—	4,08	0,2	0,34	2,32	0,13	0,31	0,02	0,02
	61,16	21,88	—	8,77	—	3,99	0,18	0,22	3,21	0,16	0,31	0,05	0,06
	62,73	22,13	—	9,1	—	3,35	0,18	0,21	1,89	0,1	0,25	0,03	0,02
	62,91	21,82	—	8,83	—	3,73	0,13	0,19	1,94	0,1	0,23	0,04	0,07
	62,32	21,69	—	9,16	—	4,02	0,3	0,27	1,74	0,16	0,22	0,03	0,08
	62,46	21,98	—	8,75	—	4,11	0,21	0,25	1,85	0,11	0,21	0,03	0,03
	52,54	22,04	12,6	9,09	0,05	0,13	1,2	0,27	1,57	0,09	0,21	0,064	0,13
	54,56	21,17	11,7	9,21	0,04	0,04	0,84	0,49	1,4	0,24	0,19	0,07	0,12
	54,57	22,51	12,67	8,91	—	—	1,05	—	0,13	0,04	0,04	0,07	—
	54,75	22,31	12,46	9,09	—	—	1,06	—	0,15	0,02	0,08	0,07	—
	37,85	17,75	0,09	—	—	—	—	—	40,69	1,15	2,35	0,05	0,07
	20,9	17,65	0,13	—	—	—	—	—	57,79	1,12	2,32	0,04	0,05
	35,7	18,5	0,19	—	—	—	—	—	42,01	1,24	2,24	0,05	0,07
	36,9	17,95	0,23	—	—	—	—	—	41,38	1,24	2,17	0,05	0,08
	36,4	18,25	0,31	—	—	—	—	—	41,41	1,15	2,23	0,04	0,21
	50,97	19,6	19,9	5,95	—	—	0,45	2,25	0,22	0,32	0,24	0,09	0,01
	51,73	19,5	19,3	5,89	—	—	0,46	2,27	0,18	0,38	0,23	0,045	0,01
	55,59	18,85	13,7	7,06	—	—	2,11	1,99	0,38	0,06	0,19	0,04	0,03
	55,39	18,95	13,6	7,33	—	—	2,08	1,95	0,32	0,14	0,15	0,06	0,03
	51,58	19,4	19,7	5,89	—	—	0,45	2,24	0,22	0,33	0,13	0,05	0,01
	51,94	19,5	19,5	5,67	—	—	0,43	2,3	0,13	0,35	0,12	0,045	0,01
	51,5	19,4	19,9	5,7	—	—	0,48	2,29	0,17	0,36	0,14	0,045	0,01
	51,8	19,45	19,6	5,79	—	—	0,42	2,27	0,19	0,4	0,014	0,055	0,01
	51,56	19,45	19,7	5,81	—	—	0,4	2,29	0,21	0,38	0,13	0,055	0,01

Dénomination	Ni	Cr	Co	Mo	W	Nb	Al	Ti	Fe	Mn	Si	C	Cu
Données originelles (NiDI)													
Astroloy	55,11	15	17	5,3	—	—	4	3,5	—	—	—	0,06	—
D-979	45,49	15	—	4	4	—	1	3	27	0,25	0,2	0,05	—
Hastelloy X	47,3	22	1,5	9	0,6	—	—	—	18,5	0,5	0,5	0,1	—
Hastelloy S	67,87	15,5	—	14,5	—	—	0,2	—	1	0,5	0,4	0,02	—
Inconel 600	75,72	15,5	—	—	—	—	—	—	8	0,5	0,2	0,08	—
Inconel 601	60,75	23	—	—	—	—	1,4	—	14,1	0,5	0,2	0,05	—
Inconel 617	55,43	22	12,5	9	—	—	1	—	—	—	—	0,07	—
Inconel 625	62,55	21,5	—	9	—	3,6	0,2	0,2	2,5	0,2	0,2	0,05	—
Inconel 690	60,47	30	—	—	—	—	—	—	9,5	—	—	0,03	—
Inconel X-750	72,56	15,5	—	—	—	1	0,7	2,5	7	0,5	0,2	0,04	—
IN-102	67,93	15	—	3	3	3	0,4	0,6	7	—	—	0,06	—
IN-587	47,2	28,5	20	—	—	0,7	1,2	2,3	—	—	—	0,05	—
IN-597	48,39	24,5	20	1,5	—	1	1,5	3	—	—	—	0,05	—
M-252	55,25	20	10	10	—	—	1	2,6	—	0,5	0,5	0,15	—
Nimonic 75	76,4	19,5	—	—	—	—	—	0,4	3	0,3	0,3	0,1	—
Nimonic 80A	75,98	19,5	—	—	—	—	1,4	2,4	—	0,3	0,3	0,06	—
Nimonic 81	66,61	30	—	—	—	—	0,9	1,8	—	0,3	0,3	0,03	—
Nimonic 90	59,37	19,5	16,5	—	—	—	1,45	2,45	—	0,3	0,3	0,07	—
Nimonic 105	53,27	15	20	5	—	—	4,7	1,2	—	0,3	0,3	0,13	—
Nimonic 115	60,25	14,3	13,2	3,3	—	—	4,9	3,7	—	—	—	0,15	—
Nimonic 263	50,77	20	20	5,9	—	—	0,45	2,15	—	0,4	0,25	0,06	—
Nimonic 942	39,66	12,5	—	6	—	—	0,6	3,7	37	0,2	0,3	0,03	—
Nimonic PE11	37,92	18	—	5,2	—	—	0,8	2,3	35	0,2	0,3	0,05	—
Nimonic PE16	43,41	16,5	—	3,2	—	—	1,2	1,2	34,4	—	—	0,05	—
Nimonic PK33	56,06	19	14	7	—	—	1,9	2	—	—	—	0,04	—
Pyromet 860	42,99	12,6	4	6	—	—	1,25	3	30	0,05	0,05	0,05	—
René 41	55,31	19	11	10	—	—	1,5	3,1	—	—	—	0,09	—
RGT 4	66,64	20	—	4,5	—	—	1,4	2,4	5	—	—	0,06	—
RGT 13	48,44	20	18	4,5	—	—	1,5	2,5	5	—	—	0,06	—
Udimet 400	59,87	17,5	14	4	—	0,5	1,5	2,5	—	—	—	0,06	—
Udimet 500	53,56	18	18,5	4	—	—	2,9	2,9	—	—	—	0,08	—
Udimet 520	56,95	19	12	6	1	—	2	3	—	—	—	0,05	—
Udimet 630	49,97	18	—	3	3	6,5	0,5	1	18	—	—	0,03	—
Udimet 700	53,39	15	18,5	5,2	—	—	4,3	3,5	—	—	—	0,08	—
Udimet 710	54,91	18	15	3	1,5	—	2,5	5	—	—	—	0,07	—
AF2-IDA	58,44	12	10	3	6	—	4,6	3	1	—	—	0,35	—
Waspaloy	58,25	19,5	13,5	4,3	—	—	1,3	3	—	—	—	0,08	—
901	42,535	12,5	—	5,7	—	—	0,2	2,8	36	0,1	0,1	0,05	—
A-286	25,585	15	—	1,3	—	—	0,2	2	54	1,35	0,5	0,05	—
Discaloy	26,255	13,5	—	2,7	—	—	0,1	1,7	54	0,9	0,8	0,04	—
Haynes 556	20	22	20	3	2,5	0,1	0,3	—	29	1,5	0,4	0,1	—
Incoloy 800	30,85	21	—	—	—	—	0,4	0,4	46	0,8	0,5	0,05	—
Incoloy 801	32,55	20,5	—	—	—	—	—	1,1	44,5	0,8	0,5	0,05	—
Incoloy 802	30,9	21,5	—	—	—	—	—	—	46	0,8	0,4	0,4	—
Incoloy 807	39,95	20,5	8	0,1	5	—	0,2	0,3	25	0,5	0,4	0,05	—
Incoloy 903	38,9	—	15	—	—	3	0,7	1,4	41	—	—	—	—
Incoloy 904	46,62	—	14,5	—	—	—	0,8	2,3	35	0,2	0,3	0,05	—
N-155	20,27	21	20	3	2,58	1	—	—	30	1,5	0,5	0,15	—
V-57	27,51	14,8	—	1,25	—	—	0,25	3	52	0,35	0,75	0,08	—

Dénomination	Ni	Cr	Co	Mo	W	Nb	Al	Ti	Fe	Mn	Si	C	Cu
Haynes													
High temp.													
S	64,35	15,75	1	15,25	0,5	—	0,3	—	1,5	0,65	0,48	0,01	0,18
W	62,39	5	1,25	24	—	—	—	—	6	0,5	0,5	0,06	—
X	47,8	22	1,5	9	0,6	—	—	—	18	0,5	0,5	0,1	—
25	10	20	51,7	—	15	—	—	—	1,5	1,5	0,2	0,1	—
R-41	52,5	19	11	10	—	—	1,5	3,1	2,5	0,05	0,25	0,09	—
75	73,52	20	—	—	—	—	—	0,4	5	0,5	0,5	0,08	—
HR-120	37,25	25	1,5	1,25	1,25	0,7	0,1	—	31,4	0,7	0,6	0,05	—
HR-160	36,7	28	29	0,5	0,5	0,5	—	0,5	1	0,5	2,75	0,05	—
HR-224	48,7	20	—	—	—	—	3,8	—	27,5	—	—	—	—
NS-163	8	28	39,8	—	—	1	0,25	1,3	21	0,25	0,25	0,1	—
188	22,01	22	39,4	—	14	—	—	—	1,5	0,63	0,35	0,1	—
214	76,05	16	—	—	—	—	4,5	—	3	0,25	0,1	0,05	—
230	56,69	22	2,5	2	14	—	0,3	—	1,5	0,5	0,4	0,1	—
242	63,43	8	1,25	25	—	—	0,25	—	1	0,4	0,4	0,015	0,25
263	51,49	20	20	6	—	—	0,3	1,2	0,35	0,3	0,2	0,06	0,1
282	56,86	20	10	8,5	—	—	1,5	2,1	0,75	0,15	0,08	0,06	—
556	18,58	22	18	3	2,5	0,5	0,2	—	32,9	1	0,4	0,1	—
617	53,93	22	12,5	9	—	—	1,2	0,3	1	—	—	0,07	—
625	62,35	21	0,5	9	—	3,7	0,2	0,2	2,5	0,25	0,25	0,05	—
625SQ	62,55	21	0,5	9	—	3,7	0,2	0,2	2,5	0,25	0,08	0,015	—
718	52,63	18	0,5	3	—	5	0,5	0,9	19	0,18	0,18	0,05	0,05
X-750	70,8	16	0,5	—	—	1	0,8	2,5	8	0,18	0,18	0,04	—
Multimet (N-155)	—	21,25	19,75	3	2,5	1	—	—	50,38	1,5	0,5	0,12	—
Waspaloy	57,38	19	13,5	4,3	—	—	1,5	3	1	0,05	0,08	0,08	0,05
Corrosion													
B-2	69,41	0,5	0,5	28	—	—	—	—	1	0,5	0,05	0,01	—
B-3	63,6	1,5	1,5	28,5	1,5	—	0,25	0,1	1,5	1,5	0,05	0,005	—
Hybrid-BC1	61,83	15	—	22	—	—	0,25	—	0,63	0,25	0,04	0,005	—
C-4	65,09	16	1	15,5	—	—	—	0,35	1,5	0,5	0,04	0,005	—
C-22	57,28	22	1,25	13	3	—	—	—	3	0,25	0,04	0,005	—
C-22HS	59,3	21	0,5	17	0,5	—	0,25	—	1	0,4	0,04	0,005	—
C-276	57,03	16	1,25	16	4	—	—	—	5	0,5	0,04	0,005	—
C-2000	57,36	23	—	16	—	—	0,25	—	1,5	0,25	0,04	0,005	1,6
G*	43,81	22,25	1,25	6,5	0,5	2,13	—	—	19,5	1,5	0,5	0,025	2
G-3*	44,61	22,2	2,5	7	0,75	0,3	—	—	19,5	0,8	0,4	0,008	1,9
G-30	41,51	29,75	2,5	5	2,75	0,6	—	—	15	0,75	0,4	0,015	1,7
G-35	57,23	33	—	8	—	—	0,2	—	1	0,25	0,3	0,025	—
G-50*	49,84	20	1,25	9	0,5	0,5	0,4	—	17,5	0,5	—	0,01	0,5
N	72,67	7	0,1	16	0,25	—	0,18	0,18	2,5	0,4	0,5	0,04	0,18
Ultimet	8,92	26	53,84	5	2	—	—	—	3	0,8	0,3	0,06	—
Wear													
6-B	2,65	30	58	0,75	4	—	—	—	1,5	1,4	0,7	1	—

Dénomination	Ni	Cr	Co	Mo	W	Nb	Al	Ti	Fe	Mn	Si	C	Cu
Special Metals													
Duranickel													
301	93,66	—	—	—	—	—	4,38	0,63	0,3	0,25	0,5	0,15	0,13
Inconel													
587*	47	28,5	20	—	—	0,7	1,2	2,3	—	0,1	0,1	0,05	—
597* (Nimonic 101)	48,11	24,5	20	1,5	—	1	1,5	3	—	0,1	0,18	0,05	—
600	75,41	15,5	—	—	—	—	—	—	8	0,5	0,25	0,08	0,25
601	59,99	23	—	—	—	—	1,35	—	14,35	0,5	0,25	0,05	0,5
603XL	77,2	19	—	2	—	—	0,25	0,25	—	0,15	1	0,15	—
617	52,19	22	12,5	9	—	—	1,15	0,3	1,5	0,5	0,5	0,1	0,25
625	61,88	21,5	0,5	9	—	3,65	0,2	0,2	2,5	0,25	0,25	0,05	—
686	57,73	21	—	16	3,7	—	—	0,12	1	0,38	0,04	0,005	—
690	61,24	29	—	—	—	—	—	—	9	0,25	0,25	0,003	0,25
693	60,42	29	—	—	—	1,5	3,25	0,5	4,25	0,5	0,25	0,08	0,25
700***	46,56	15	28,5	3,75	—	—	3	2,35	0,4	0,15	0,15	0,1	0,03
706	40,99	16	0,5	—	—	2,9	0,2	1,75	37,1	0,18	0,18	0,03	0,15
718	51,95	19	0,5	3,05	—	5,13	0,5	0,9	18,4	0,18	0,18	0,04	0,15
725	56,98	20,75	—	8,25	—	3,38	0,18	1,35	8,8	0,18	0,1	0,015	—
740	48,27	25	20	0,5	—	2	0,9	1,8	0,7	0,3	0,5	0,03	—
740H	49,71	24,5	20	0,1	—	1,5	1,35	1,35	1	0,3	0,15	0,03	0,25
X-750	71,81	15,5	0,5	—	—	0,95	0,7	2,5	7	0,5	0,25	0,04	0,25
751	72	15,5	—	—	—	0,95	1,2	2,3	7	0,5	0,25	0,05	0,25
783	27,97	3	34	—	—	3	5,5	0,25	25,5	0,25	0,25	0,015	0,25
N06230	56,37	22	2,5	2	14	—	0,35	—	1,5	0,65	0,5	0,1	—
C-276	57,24	15,5	1,25	16	3,75	—	—	—	5,5	0,5	0,04	0,005	—
HX	47,52	21,75	1,5	9	0,6	—	—	—	18,5	0,5	0,5	0,1	—
22 (622)	56,5	21,25	1,25	13,5	3	—	—	—	4	0,25	0,04	0,008	—
G-3	44,71	22,25	2,5	7	0,75	0,25	—	—	19,5	0,5	0,5	0,008	2
Udimet													
188	22	22	38,88	—	14,5	—	—	—	1,5	0,68	0,35	0,08	—
L-605	10	20	51,69	—	15	—	—	—	1,5	1,5	0,2	0,1	—
400*	59,87	17,5	14	4	—	0,5	1,5	2,5	—	—	—	0,06	—
500*	49,92	19	19	4	—	—	3	3	2	—	—	0,08	—
520	56,07	19	12,5	6,25	1	—	2,05	3,08	—	—	—	0,04	—
630*	56,76	17	—	3	3	6,5	0,7	1	18	—	—	0,04	—
700*	53,2	15	18,5	5	—	—	4,3	3,4	0,5	—	—	0,07	—
710*	55,12	18	14,8	3	1,5	—	2,5	5	—	—	—	0,07	—
720	57,43	16	14,75	3	1,25	—	2,5	5	—	—	—	0,015	—
D-979	45	15	—	3,75	3,75	—	1,03	3	27,66	0,38	0,38	0,04	—
R41	52,93	19	11	9,75	—	—	1,6	3,15	2,5	—	—	0,06	—
Nimonic													
75	76,23	19,5	—	—	—	—	—	0,4	2,5	0,5	0,5	0,12	0,25
80A	73,11	19,5	1	—	—	—	1,4	2,25	1,5	0,5	0,5	0,05	0,1
86	64,95	25	—	10	—	—	—	—	—	—	—	0,05	—
90	56,48	19,5	18	—	—	—	1,5	2,5	0,75	0,5	0,5	0,07	0,1
105	52,5	14,85	20	5	—	—	4,7	1,2	0,5	0,5	0,5	0,06	0,1
115	55,88	15	14,25	4	—	—	5	4	0,5	0,5	0,5	0,16	0,1
263	50,58	20	20	5,85	—	—	0,4	2,15	0,35	0,3	0,2	0,06	0,1
901	42	12,5	0,5	5,75	—	—	0,18	2,95	35,36	0,25	0,2	0,05	0,25
942*	39,66	12,5	—	6	—	—	0,6	3,7	37	0,2	0,3	0,03	—

Dénomination	Ni	Cr	Co	Mo	W	Nb	Al	Ti	Fe	Mn	Si	C	Cu
Nimonic													
PE11	39	18	0,5	5,25	—	—	0,85	2,35	33,35	0,1	0,25	0,055	0,25
PE16	42,5	16,5	1	3,3	—	—	1,2	1,2	33,6	0,1	0,25	0,06	0,25
PK33	55,47	18	14	7	—	—	2,1	2,25	0,5	0,25	0,25	0,035	0,1
Incoloy													
800	32,45	21	—	—	—	—	0,38	0,38	44,1	0,75	0,5	0,05	0,38
801*	32,02	20,5	—	—	—	—	—	1,13	46,3	—	—	0,05	—
802*	32,52	21	—	—	—	—	0,58	0,75	44,8	—	—	0,35	—
803	34,52	27	—	—	—	—	0,38	0,38	36	0,75	0,5	0,08	0,38
807*	40,15	20,5	8	0,1	5	—	—	0,3	25	0,5	0,4	0,05	—
825	42	21,5	—	3	—	—	0,1	0,9	29,46	0,5	0,25	0,025	2,25
864	34	22,5	—	4,4	—	—	—	0,7	37,54	0,01	0,8	0,04	—
865	16	24	—	2	—	—	—	—	57,21	0,5	—	0,01	—
890**	42,5	25	—	1,5	—	0,4	0,1	0,5	27	0,5	1,8	0,1	0,38
903	38	—	15	—	—	2,95	0,73	1,43	41,89	—	—	—	—
907	37,5	—	14	—	—	4,75	0,1	1,55	41,89	—	0,21	—	—
909	37,5	—	14	—	—	4,75	0,08	1,55	41,71	—	0,38	0,03	—
925	44	21	—	3	—	—	0,3	2,15	27,29	—	—	0,015	2,25
945	50	21,25	—	3,5	—	3,5	0,36	1,5	16,84	0,5	0,25	0,023	2,25
20	36	20	—	2,5	—	0,5	—	—	35,92	1	0,5	0,035	3,5
28	32	27	—	3,5	—	—	—	—	34,71	1,25	0,5	0,015	1
330	35,49	18,5	—	—	—	—	—	—	43,54	1	1,13	0,04	—
25-6MO	25	20	—	6,5	—	—	—	—	46,02	1	0,25	0,01	1
25-6HN	24,5	21	—	6,5	—	—	—	—	45,85	1	0,5	0,015	0,38
27-7MO	27	21,75	—	7,25	—	—	—	—	40,87	1,5	0,25	0,01	1
A-286	25,5	14,75	—	1,25	—	—	0,18	2,13	54,33	1	0,5	0,04	—
Monel													
400	66,34	—	—	—	—	—	—	—	1,25	1	0,012	0,15	31
401**	44,31	—	—	—	—	—	—	—	0,38	1,13	0,125	0,05	54
404	54,51	—	—	—	—	—	0,03	—	0,25	0,05	0,05	0,08	45,02
R-405	66,31	—	—	—	—	—	—	—	1,25	1	0,25	0,15	31
450**	32,78	—	—	—	—	—	—	—	0,7	0,5	—	—	66
K500	64,55	—	—	—	—	—	2,725	0,6	1	0,75	0,25	0,125	30
Ferry	43,7	—	—	—	—	—	—	—	0,5	0,5	0,25	0,05	55
Nilo													
36	36,5	0,25	0,5	0,25	—	—	—	—	61,94	0,3	0,18	0,05	—
42	42	0,13	0,5	—	—	—	0,08	—	56,69	0,4	0,15	0,025	—
48	48	0,13	0,5	—	—	—	0,05	—	50,72	0,4	0,15	0,025	—
K	29,18	0,1	17	0,1	—	—	0,05	0,05	53	0,25	0,1	0,02	0,1
NI-SPAN-C 902	42,25	5,33	—	—	—	—	0,55	2,48	48,42	0,4	0,5	0,03	—
Waspaloy	56,05	19,5	13,5	4,25	—	—	1,4	3	1	0,5	0,38	0,06	0,25
Incotherm TD	72,98	22	—	3	—	—	0,05	—	0,5	0,05	1,4	0,025	—

Dénomination	Ni	Cr	Co	Mo	W	Nb	Al	Ti	Fe	Mn	Si	C	Cu
Carpenter													
Pyromet													
31V	57	22,7	—	2	—	0,85	1,3	2,3	13,59	0,1	0,1	0,04	—
41	52,85	19	11	9,75	—	—	1,5	3,15	2,5	0,05	0,1	0,09	—
600	75,44	15,5	—	—	—	—	—	—	8	0,5	0,25	0,05	0,25
617	52,19	22	12,5	9	—	—	1,15	0,3	1,5	0,5	0,5	0,1	0,25
625	61,88	21,5	0,5	9	—	3,65	0,2	0,2	2,5	0,25	0,25	0,05	—
680	47,52	21,75	1,5	9	0,6	—	—	—	18,5	0,5	0,5	0,1	—
706	41,5	16	—	—	—	2,9	0,2	1,75	37,09	0,18	0,18	0,03	0,15
718	52	19	0,5	3,05	—	5,13	0,58	0,9	18,34	0,18	0,18	0,04	0,08
X-750	72,18	15,5	0,5	—	—	0,95	0,7	2,48	7	0,15	0,25	0,04	0,25
860*	42,99	12,6	4	6	—	—	1,25	3	30	0,05	0,05	0,05	—
901	42,5	12,5	—	6	—	—	0,18	2,73	34,98	0,5	0,3	0,05	0,25
A-286	25,5	14,75	—	1,25	—	—	0,18	2,1	54,37	1	0,5	0,04	—
NCF 3015	31,75	14,5	—	0,7	—	0,65	1,9	2,6	47,35	0,25	0,25	0,04	—
Waspaloy	56,57	19,5	13,5	4,25	—	—	1,35	3	1	0,25	0,38	0,06	0,05
Thermo-Span	24,5	5,5	29	—	—	4,85	0,45	0,85	34,05	0,25	0,25	0,025	0,25
Kovar	29	—	17	—	—	—	—	—	53,49	0,3	0,2	0,01	—
20Mo-6	35	24	—	5,85	—	—	—	—	31,36	0,5	0,25	0,015	3
20Mo-6 HS	35	24	—	5,85	—	—	—	—	32,05	0,5	0,25	0,03	2
20Cb-3	33,75	20	—	2,5	—	0,63	—	—	38,05	1	0,5	0,03	3,5
L-605	10	20	51,67	—	15	—	—	—	1,5	1,5	0,2	0,1	—
MP35N	35	20	34,06	9,75	—	—	—	0,5	0,5	0,08	0,08	0,01	—
ThyssenKrupp VDM													
Nicrofer													
3127 hMo (31)	31	27	—	6,5	—	—	—	—	32,93	1	0,15	0,008	1,2
3620 Nb (20)	35	20	0,75	2,5	—	0,64	—	—	36,05	1	0,5	0,035	3,5
5120CoTi (C-263)	50,52	20	20	5,85	—	—	0,45	2,15	0,35	0,3	0,2	0,06	0,1
5219 Nb (718)	52,5	19	0,5	3,05	—	5,13	0,5	0,9	17,82	0,18	0,18	0,04	0,15
5520 Co (617)	54,55	21,5	11,5	9	—	—	1,05	0,35	1	0,35	0,35	0,08	0,25
5923 hMo (59) _{min}	59,78	23	0,15	15,75	—	—	0,25	—	0,75	0,25	0,05	0,005	—
6020 hMo (625)	61,63	22	0,5	9	—	3,5	0,2	0,2	2,5	0,25	0,2	0,015	—
6023 H (601)	65,31	23	—	—	—	—	1,35	0,25	9	0,5	0,25	0,065	0,25
6025 HT (602 CA)	62,38	25	—	—	—	—	2,1	0,15	9,5	0,25	0,25	0,2	0,1
6030 (690)	61,22	29	—	—	—	—	—	—	9	0,25	0,25	0,025	0,25
7016 TiAl (751)	72,06	15,5	—	—	—	0,95	1,2	2,25	7	0,5	0,25	0,04	0,25
7016 TiNb (X-750)	71,81	15,5	0,5	—	—	0,95	0,7	2,5	7	0,5	0,25	0,04	0,25
7216 (600)	75,11	15,5	—	—	—	—	0,15	0,15	8	0,5	0,25	0,075	0,25
7520 (75)	75,59	20	—	—	—	—	0,15	0,4	2,5	0,5	0,5	0,11	0,25
7520 Ti (80A)	74,92	19,5	—	—	—	—	1,4	2,25	0,75	0,5	0,5	0,07	0,1
Nimofer													
6928 (B-2)	68,19	0,7	0,5	28	—	—	—	—	1,8	0,5	0,04	0,005	0,25
Cronifer													
40B	37,5	21,5	—	—	—	—	0,25	—	38,16	0,5	1,75	0,06	0,25
Nicorros													
400	66,03	—	—	—	—	—	0,25	—	1,75	0,63	0,25	0,08	31
K-500	64,31	—	—	—	—	—	2,73	0,6	1,25	0,75	0,25	0,1	30
Pernifer													
36	36	0,125	0,25	—	—	—	—	—	63,02	0,3	0,2	0,08	—

Dénomination	Ni	Cr	Co	Mo	W	Nb	Al	Ti	Fe	Mn	Si	C	Cu
Aubert & Duval													
AD730	59,14	15,8	8,5	3	2,7	1,1	2,3	3,4	4	—	—	0,015	—
NY690	59,98	30	—	—	—	—	—	—	10	—	—	0,025	—
PER3	59,17	19	13,5	4	—	—	1,3	3	—	—	—	0,03	—
PER5	52,92	18	18,5	4	—	—	3	3	0,5	—	—	0,08	—
PER625	62,49	22	—	9	—	3,6	0,2	0,2	2,5	—	—	0,015	—
PER706	42,08	16	—	—	—	2,9	0,2	1,8	37	—	—	0,02	—
PER72	55,26	18	15	3	1,2	—	2,5	5	—	—	—	0,04	—
PER75	74,5	20	2,5	—	—	—	—	0,15	2,5	—	—	0,1	0,25
PER718	53,86	18	—	3	—	5,2	0,5	0,9	18,5	—	—	0,04	—
Rolled Alloys													
AL-6XN	24,5	21	—	6,5	—	—	—	—	45,85	1	0,5	0,015	0,38
RA333	45,5	25,5	3,25	3,25	3,25	—	—	—	17,05	1	1,13	0,04	—
ASM Handbooks / Autres sources													
19-9DL*	9	19	—	1,25	1,25	0,4	—	0,3	66,8	1,1	0,6	0,3	—
V-57*	31,8	14,8	—	1,25	—	—	0,25	3	48,6	—	—	0,04	—
Discaloy*	25,99	14	—	3	—	—	0,25	1,7	55	—	—	0,06	—
16-25-6*	25,1	16	—	6	—	—	—	—	50,7	1,35	0,7	—	—
M-252***	55,09	19	10	10	—	—	0,8	2,5	0,8	1,1	0,6	0,1	—
IN-102*	68,11	15	—	2,9	3	2,9	0,5	0,5	7	—	—	0,06	—

Bibliographie

1. KAUFMAN, L. & BERNSTEIN, H. [Computer Calculation of Phase Diagrams: with Special Reference to Refractory Metals](#), Academic Press, New York (1970), ISBN : 978-0-12-402050-4, cf. pages 4, 18.
2. SAUNDERS, N., CAHN, R. W., MCLEAN, M., RAPPAZ, M. & PETTIFOR, D. G. [Phase diagram calculations for high-temperature structural materials](#), *Philosophical Transactions: Physical Sciences and Engineering* **351** (1697), 543–561 (1995), cf. pages 4, 71.
3. BHADSHIA, H. K. D. H., MACKEY, C. & SVENSSON, E. [Impact toughness of C-Mn steel arc welds: Bayesian neural network analysis](#), *Materials Science and Technology* **11** (10), 1046–1051 (1995), cf. pages 5, 28.
4. JONES, J. & MACKEY, D. J. C. [Neural network modelling of the mechanical properties of nickel base superalloys](#), *Superalloys 1996 (Eighth International Symposium)*, 417–424, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (1996), cf. pages 5, 28, 35.
5. BAILER-JONES, C. A. L., BHADSHIA, H. K. D. H. & MACKEY, D. J. C. [Gaussian process modelling of austenite formation in steel](#), *Materials Science and Technology* **15** (3), 287–294 (1999), cf. pages 5, 35.
6. OLSON, G. B. [Computational Design of Hierarchically Structured Materials](#), *Science* **277** (5330), 1237–1242 (1997), cf. page 5.
7. XIONG, W. & OLSON, G. B. [Integrated computational materials design for high-performance alloys](#), *Materials Research Society Bulletin* **40** (12), 1035–1044 (2015), cf. page 5.
8. RAE, C. M. F. [Alloys by Design: modelling next generation superalloys](#), *Materials Science and Technology* **25** (4), 479–487 (2009), cf. page 5.
9. [QUESTEK INNOVATIONS LLC. Example Projects](#). En ligne : <http://www.questek.com/example-projects.html> (visité le 12/05/2016), cf. page 5.
10. BRUN, F., YOSHIDA, T., ROBSON, J. D., NARAYAN, V., BHADSHIA, H. K. D. H. & MACKEY, D. J. C. [Theoretical design of ferritic creep resistant steels using neural network, kinetic, and thermodynamic models](#), *Materials Science and Technology* **15** (5), 547–554 (1999), cf. pages 5, 21, 28.
11. SMALL, C. J. & SAUNDERS, N. [The Application of CALPHAD Techniques in the Development of a New Gas-Turbine Disk Alloy](#), *Materials Research Society Bulletin* **24** (4), 22–26 (1999), cf. pages 5, 21.
12. SAUNDERS, N., FAHRMANN, M. & SMALL, C. J. [The Application of CALPHAD Calculations to Ni-Based Superalloys](#), *Superalloys 2000 (Ninth International Symposium)*, 803–811, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2000), cf. pages 5, 21.

13. MALINOVA, T., PANTEV, N. & MALINOV, S. Prediction of surface hardness after ferritic nitrocarburising of steels using artificial neural networks, *Materials Science and Technology* **17** (2), 168–174 (2001), cf. pages 5, 28, 29.
14. SCHAFFERNAK, B. C. & CERJAK, H. H. Design of Improved Heat Resistant Materials by Use of Computational Thermodynamics, *Calphad* **25** (2), 241–251 (2001), cf. pages 5, 21.
15. TANCRET, F., BHADESHIA, H. K. D. H. & MACKEY, D. J. C. Design of a creep resistant nickel base superalloy for power plant applications: Part 1 — Mechanical properties modelling, *Materials Science and Technology* **19** (3), 283–290 (2003), cf. pages 5, 21, 35, 77, 78, 103.
16. DE CARLAN, Y., MURUGANANTH, M., SOURMAIL, T. & BHADESHIA, H. K. D. H. Design of new Fe-9CrWV reduced-activation martensitic steels for creep properties at 650 °C, *Journal of Nuclear Materials* **329-333** (Part A), 238–242 (2004), cf. pages 5, 28.
17. YOO, Y. S., KIM, I. S., KIM, D. H., JO, C. Y., KIM, H. M. & JONES, C. N. The Application of Neural Network to the Development of Single Crystal Superalloys, *Superalloys 2004 (Tenth International Symposium)*, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2004), cf. pages 5, 28.
18. KNEŽEVIĆ, V., BALUN, J., SAUTHOFF, G., INDEN, G. & SCHNEIDER, A. Design of martensitic/ferritic heat-resistant steels for application at 650 °C with supporting thermodynamic modelling, *Materials Science and Engineering A* **477** (1-2), 334–343 (2008), cf. pages 5, 21.
19. REED, R. C., TAO, T. & WARNKEN, N. Alloys-By-Design: Application to nickel-based single crystal superalloys, *Acta Materialia* **57** (19), 5898–5913 (2009), cf. pages 5, 99.
20. BHATTACHARYYA, T., SINGH, S. B., SIKDAR (DEY), S., BHATTACHARYYA, S., BLECK, W. & BHATTACHARJEE, D. Microstructural prediction through artificial neural network (ANN) for development of transformation induced plasticity (TRIP) aided steel, *Materials Science and Engineering A* **565**, 148–157 (2013), cf. pages 5, 28.
21. CRUDDEN, D. J., RAEISINIA, B., WARNKEN, N. & REED, R. C. Analysis of the chemistry of Ni-base turbine disk superalloys using an alloys-by-design modeling approach, *Metallurgical and Materials Transactions A* **44** (5), 2418–2430 (2013), cf. pages 5, 21, 28.
22. HUANG, H., SHERIF, M. Y. & RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. Combinatorial optimization of carbide-free bainitic nanostructures, *Acta Materialia* **61** (5), 1639–1647 (2013), cf. pages 5, 21.
23. CRUDDEN, D. J., MOTTURA, A., WARNKEN, N., RAEISINIA, B. & REED, R. C. Modelling of the influence of alloy composition on flow stress in high-strength nickel-based superalloys, *Acta Materialia* **75**, 356–370 (2014), cf. pages 5, 21.
24. GAO, M. C., CARNEY, C. S., DOĞAN, Ö. N., JABLONKSI, P. D., HAWK, J. A. & ALMAN, D. E. Design of Refractory High-Entropy Alloys, *Journal of Materials* **67** (11), 2653–2669 (2015), cf. pages 5, 22.
25. GUO, J., LIAO, B., LIU, L., GAO, Y., REN, X. & YANG, Q. Composition Optimization and Experimental Characterization of a Novel Steel Based on CALPHAD, *Journal of Materials Engineering and Performance* **24** (5), 2099–2107 (2015), cf. pages 5, 21.
26. ZHU, Z., HÖGLUND, L., LARSSON, H. & REED, R. C. Isolation of optimal compositions of single crystal superalloys by mapping of a material's genome, *Acta Materialia* **90**, 330–343 (2015), cf. page 5.
27. MAHFOUF, M. Optimal Design of Alloy Steels Using Genetic Algorithms. *Advances in Computational Intelligence and Learning: Methods and Applications* 425–436, Springer Netherlands, Dordrecht (2002), cf. pages 6, 8, 41.

28. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & van der ZWAAG, S. Designing nanoprecipitation strengthened UHS stainless steels combining genetic algorithms and thermodynamics, *Computational Materials Science* **44** (2), 678–689 (2008), cf. pages 6, 8, 21, 42.
29. DAS, P., MUKHERJEE, S., GANGULY, S., BHATTACHARYAY, B. K. & DATTA, S. Genetic algorithm based optimization for multi-physical properties of HSLA steel through hybridization of neural network and desirability function, *Computational Materials Science* **45** (1), 104–110 (2009), cf. pages 6, 8, 42.
30. TANCRET, F. Computational thermodynamics, Gaussian processes and genetic algorithms: combined tools to design new alloys, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **21** (4) N°045013 (2013), cf. pages 6, 8, 21, 35, 42.
31. CONDUIT, B. D., JONES, N. G., STONE, H. J. & CONDUIT, G. J. Concurrent materials design En ligne : <http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/~gjc29/Papers/ConduitJonesStoneConduit14.pdf> (visité le 15/07/2016) (2014), cf. pages 6, 8, 28, 44.
32. RETTIG, R., RITTER, N. C., HELMER, H. E., NEUMEIER, S. & SINGER, R. F. Single-crystal nickel-based superalloys developed by numerical multi-criteria optimization techniques: design based on thermodynamic calculations and experimental validation, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **23** (3) N°035004 (2015), cf. pages 8, 44.
33. RETTIG, R. & SINGER, R. F. Fast interpolation algorithm for the calculation of thermodynamic property maps of microstructures, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **22** (8) N°085002 (2014), cf. page 8.
34. SUN, Y., ZENG, W. D., HAN, Y. F., MA, X. & ZHAO, Y. Q. Optimization of chemical composition for TC11 titanium alloy based on artificial neural network and genetic algorithm, *Computational Materials Science* **50** (3), 1064–1069 (2011), cf. pages 8, 28, 42.
35. REDDY, N. S., KRISHNAIAH, J., YOUNG, H. B. & LEE, J. S. Design of medium carbon steels by computational intelligence techniques, *Computational Materials Science* **101**, 120–126 (2015), cf. pages 8, 42.
36. RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & XU, W. Heat Treatment and Composition Optimization of Nanoprecipitation Hardened Alloys, *Materials and Manufacturing Processes* **26** (3), 375–381 (2011), cf. pages 8, 21, 42.
37. TANCRET, F. Computational thermodynamics and genetic algorithms to design affordable γ' -strengthened nickel–iron based superalloys, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **20** (4) N°045012 (2012), cf. pages 8, 21, 35, 42, 209.
38. LU, Q., van der ZWAAG, S. & XU, W. High-throughput design of low-activation, high-strength creep-resistant steels for nuclear-reactor applications, *Journal of Nuclear Materials* **469**, 217–222 (2016), cf. pages 8, 21, 42.
39. MAHFOUF, M., JAMEI, M. & LINKENS, D. A. Optimal Design of Alloy Steels Using Multiobjective Genetic Algorithms, *Materials and Manufacturing Processes* **20** (3), 553–567 (2005), cf. pages 8, 27, 43.
40. EGOROV-YEGOROV, I. N. & DULIKRAVICH, G. S. Chemical Composition Design of Superalloys for Maximum Stress, Temperature, and Time-to-Rupture Using Self-Adapting Response Surface Optimization, *Materials and Manufacturing Processes* **20** (3), 569–590 (2005), cf. pages 8, 30, 38, 44.
41. ZHANG, Q. & MAHFOUF, M. A nature-inspired multi-objective optimisation strategy based on a new reduced space searching algorithm for the design of alloy steels, *Engineering Applications of Artificial Intelligence* **23** (5), 660–675 (2010), cf. pages 8, 43.

42. BHARGAVA, S., DULIKRAVICH, G. S., MURTY, G. S., AGARWAL, A. & COLAÇO, M. J. [Stress Corrosion Cracking Resistant Aluminum Alloys: Optimizing Concentrations of Alloying Elements and Tempering](#), *Materials and Manufacturing Processes* **26** (3), 363–374 (2011), cf. pages 8, 44.
43. KUMAR, A., CHAKRABARTI, D. & CHAKRABORTI, N. [Data-Driven Pareto Optimization for Microalloyed Steels Using Genetic Algorithms](#), *Steel Research International* **83** (2), 169–174 (2012), cf. pages 8, 28, 43.
44. JHA, R., PETERSSON, F., DULIKRAVICH, G. S., SAXEN, H. & CHAKRABORTI, N. [Evolutionary Design of Nickel-Based Superalloys Using Data-Driven Genetic Algorithms and Related Strategies](#), *Materials and Manufacturing Processes* **30** (4), 488–510 (2015), cf. pages 8, 28, 30, 31, 43.
45. PATTANAYAK, S., DEY, S., CHATTERJEE, S., CHOWDHURY, S. G. & DATTA, S. [Computational intelligence based designing of microalloyed pipeline steel](#), *Computational Materials Science* **104**, 60–68 (2015), cf. pages 8, 28, 43.
46. DEY, S., GANGULY, S. & DATTA, S. [In silico Design of High Strength Aluminium Alloy Using Multi-objective GA. Swarm, Evolutionary, and Memetic Computing: 5th International Conference \(SEMCCO 2014\)](#) 316–327, Springer International Publishing (2015), cf. pages 8, 28, 43.
47. SIMÕES-MOREIRA, J. R. [Fundamentals of thermodynamics applied to thermal power plants](#). *Springer Series in Reliability Engineering* 7–39, Springer-Verlag, London (2012), ISBN : 978-1-4471-2308-8, cf. page 9.
48. YEH, J. W., CHEN, S. K., LIN, S. J., GAN, J. Y., CHIN, T. S., SHUN, T. T., TSAU, C. H. & CHANG, S. Y. [Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes](#), *Advanced Engineering Materials* **6** (5), 299–303 (2004), cf. pages 9, 147, 148, 154, 160.
49. TSAI, M.-H. & YEH, J.-W. [High-Entropy Alloys: A Critical Review](#), *Materials Research Letters* **2** (3), 107–123 (2014), cf. pages 9, 148.
50. MIRACLE, D. B., MILLER, J. D., SENKOV, O. N., WOODWARD, C., UCHIC, M. D. & TILEY, J. [Exploration and development of high entropy alloys for structural applications](#), *Entropy* **16** (1), 494–525 (2014), cf. pages 9, 22, 157.
51. DONACHIE, M. J. [Superalloys: A Technical Guide, 2nd Edition](#), American Society for Metals, Materials Park, OH (2002), ISBN : 978-0-87170-749-9, cf. pages 16, 67, 70.
52. AUGUSTINS-LECALLIER, I. [Conception de nouveaux superalliages M_dP base nickel pour disques de turbines, thèse de doctorat](#), École Nationale Supérieure des Mines de Paris (2011), cf. page 17.
53. BILLOT, T. [Comportement et endommagement en fatigue et fatigue-fluage à haute température de différents états microstructuraux du superalliage base-nickel Udimet 720, thèse de doctorat](#), École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, Poitiers (2010), cf. page 17.
54. LICAVOLI, J. J., JABLONSKI, P. D., GAO, M. C., HOLCOMB, G. & HAWK, J. A. [Enhanced Entropy Superalloy Development For Fossil Energy Applications \(IPT Task 3.3\). NETL-Crosscutting Review Meeting 2015](#), cf. page 17.
55. OKAMOTO, H. [Desk Handbook: Phase Diagrams for Binary Alloys](#), American Society for Metals (2010), ISBN : 978-0-615-03046-3, cf. page 18.
56. KATTNER, U. R. [The Thermodynamic Modeling of Multicomponent Phase Equilibria](#), *Journal of Materials* **49** (12), 14–19 (1997), cf. page 19.

57. BALE, C. W., BÉLISLE, E., CHARTRAND, P., DECTEROV, S. A., ERIKSSON, G., HACK, K., JUNG, I.-H., KANG, Y.-B., MELANÇON, J., PELTON, A. D., ROBELIN, C. & PETERSEN, S. [FactSage thermochemical software and databases — recent developments](#), *Calphad* **33** (2), 295–311 (2009), cf. page 20.
58. SAUNDERS, N., LI, X., MIODOWNIK, P. & SCHILLÉ, J. P. Computer Modelling of Materials Properties, *Materials Design Approaches and Experiences*, 185–197, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2001), cf. page 20.
59. KOZESCHNIK, E. Simulation of precipitation kinetic in interstitial-free and bake-hardening steel, thèse de doctorat, Technical University Graz (1997), cf. page 20.
60. DAVIES, R. H., DINSDALE, A. T., GISBY, J. A., ROBINSON, J. A. J. & MARTIN, S. M. [MTDATA — Thermodynamic and phase equilibrium software from the national physical laboratory](#), *Calphad* **26** (2), 229–271 (2002), cf. page 20.
61. CHANG, Y. A., YAN, X. Y., DANIEL, S. L., XIE, F. Y., CHEN, S. L. & ZHANG, F. [PANDAT and PanEngine — Their applications in multicomponent phase diagram calculation and microstructure prediction](#), *TMS Fall Meeting*, 85–96, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2001), cf. page 20.
62. SUNDMAN, B., JANSSON, B. & ANDERSSON, J. O. [The Thermo-Calc databank system](#), *Calphad* **9** (2), 153–190 (1985), cf. page 20.
63. ANDERSSON, J. O., HELANDER, T., HÖGLUND, L., SHI, P. & SUNDMAN, B. [Thermo-Calc & DICTRA, computational tools for materials science](#), *Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* **26** (2), 273–312 (2002), cf. page 20.
64. FURTADO, J. & LAIGO, J. Alliages fer-nickel-chrome stables à haute température, Brevet INPI N°FR 2 939 808-B1. (2011), cf. pages 21, 38.
65. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & van der ZWAAG, S. [A combined optimization of alloy composition and aging temperature in designing new UHS precipitation hardenable stainless steels](#), *Computational Materials Science* **45** (2), 467–473 (2009), cf. pages 21, 42.
66. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & van der ZWAAG, S. [Computational design of UHS maraging stainless steels incorporating composition as well as austenitisation and ageing temperatures as optimisation parameters](#), *Philosophical Magazine* **89** (20), 1647–1661 (2009), cf. pages 21, 42.
67. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J., WANG, W., YANG, K., BLIZNUK, V., KESTENS, L. A. I. & van der ZWAAG, S. [Genetic design and characterization of novel ultra-high-strength stainless steels strengthened by Ni₃Ti intermetallic nanoprecipitates](#), *Acta Materialia* **58** (10), 3582–3593 (2010), cf. pages 21, 42.
68. LU, Q., XU, W. & van der ZWAAG, S. [Computational design of precipitation strengthened austenitic heat-resistant steels](#), *Philosophical Magazine* **93** (25), 3391–3412 (2013), cf. page 21.
69. LU, Q., XU, W. & van der ZWAAG, S. [The design of a compositionally robust martensitic creep-resistant steel with an optimized combination of precipitation hardening and solid-solution strengthening for high-temperature use](#), *Acta Materialia* **77**, 310–323 (2014), cf. pages 21, 42.
70. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. & van der ZWAAG, S. [Genetic alloy design based on thermodynamics and kinetics](#), *Philosophical Magazine* **88** (12), 1825–1833 (2008), cf. pages 21, 42, 76.

71. XU, W., RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J., YAN, W., YANG, K., SAN MARTÍN, D., KESTENS, L. A. I. & VAN DER ZWAAG, S. A new ultrahigh-strength stainless steel strengthened by various coexisting nanoprecipitates, *Acta Materialia* **58** (11), 4067–4075 (2010), cf. pages 21, 42.
72. LU, Q., XU, W. & van der ZWAAG, S. The Computational Design of W and Co-Containing Creep-Resistant Steels with Barely Coarsening Laves Phase and $M_{23}C_6$ as the Strengthening Precipitates, *Metallurgical and Materials Transactions A* **45** (13), 6067–6074 (2014), cf. pages 21, 42.
73. XU, X., XU, W., EDERVEEN, F. H. & van der ZWAAG, S. Design of low hardness abrasion resistant steels, *Wear* **301** (1-2), 89–93 (2013), cf. page 21.
74. DEVAUX, A., PICQUÉ, B., GERVAIS, M. F., GEORGES, E., POULAIN, T. & HÉRITIER, P. AD730™ — A new nickel based superalloy for high temperature engine rotative parts, *Superalloys 2012 (12th International Symposium on Superalloys)*, 911–919, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2012), cf. pages 21, 110, 116.
75. PATEL, S. J., DE BARBADILLO, J. J., BAKER, B. A. & GOLLIHUE, R. D. Nickel base superalloys for next generation coal fired AUSC power plants, *Procedia Engineering* **55**, 246–252 (2013), cf. pages 21, 68.
76. TANCRET, F. & BHADSHIA, H. K. D. H. Design of a creep resistant nickel base superalloy for power plant applications: Part 2 — Phase diagram and segregation simulation, *Materials Science and Technology* **19** (3), 291–295 (2003), cf. page 21.
77. TANCRET, F., SOURMAIL, T., YESCAS, M. A., EVANS, R. W., MCALEESE, C., SINGH, L., SMEETON, T. & BHADSHIA, H. K. D. H. Design of a creep resistant nickel base superalloy for power plant applications: Part 3 — Experimental results, *Materials Science and Technology* **19** (3), 296–302 (2003), cf. pages 21, 35.
78. TANCRET, F., GALINDO-NAVA, E. & RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. Dynamic recrystallisation model in precipitation-hardened superalloys as a tool for the joint design of alloys and forming processes, *Materials & Design* **103**, 293–299 (2016), cf. pages 21, 208.
79. GAO, M. & ALMAN, D. Searching for Next Single-Phase High-Entropy Alloy Compositions, *Entropy* **15** (10), 4504–4519 (2013), cf. pages 21, 157.
80. YEH, A. C., TSAO, T. K., CHANG, Y. J., CHANG, K. C., YEH, J. W., CHIOU, M. S., JIAN, S. R., KUO, C. M., WANG, W. R. & MURAKAMI, H. Developing New Type of High Temperature Alloys — High Entropy Superalloys, *International Journal of Metallurgical & Materials Engineering* **1** (107), 1–4 (2015), cf. pages 22, 209.
81. ZHANG, F., ZHANG, C., CHEN, S. L., ZHU, J., CAO, W. S. & KATTNER, U. R. An understanding of high entropy alloys from phase diagram calculations, *Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* **45**, 1–10 (2014), cf. pages 22, 156.
82. LIU, Y. Q., FAN, Z. & PATEL, J. Thermodynamic approach to aluminium alloys design for semisolid metal processing, *7th S2P Advanced Semi-Solid Processing of Alloys and Composites*, 599–604, National Institute of Advanced Industrial Science et Technology, Tsukuba, Japan (2002), cf. page 22.
83. LIU, Y. Q., SHEN, J. Y., YUE, Q., CHU, M. Y., WANG, X. Z. & WANG, D. C. Alloy Development and Process Optimization for a New High Strength and High Toughness Titanium Alloys Ti-63, *Materials Science Forum* **675–677**, 905–908 (2011), cf. page 22.
84. Thermo-Calc Software AB. En ligne : <http://www.thermocalc.com/> (visité le 06/05/2016), cf. page 22.

85. *Thermo-Calc Software TCNI7 Ni-based Superalloys Database version 7*. En ligne : www.thermocalc.com/media/23655/dbd_tcni7_extended_info.pdf (visité le 06/05/2016), cf. pages 22, 157.
86. *Thermotech TTNI8 Ni-based Superalloys Database version 8*. En ligne : http://www.thermocalc.com/media/5980/dbd_ttni8_bh.pdf (visité le 06/05/2016), cf. pages 22, 157.
87. *Thermo-Calc Software TCFE8 Steels and Fe-alloys database version 8*. En ligne : http://www.thermocalc.com/media/10306/dbd_tcf8_extendedinfo.pdf (visité le 21/08/2016), cf. pages 22, 157.
88. *Scientific Group ThermoData Europe Solutions Database version 5*. En ligne : www.thermocalc.com/media/8160/ssol5_extended_info-2.pdf (visité le 06/05/2016), cf. pages 23, 157.
89. McCULLOCH, W. S. & PITTS, W. H. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity, *Bulletin of Mathematical Biophysics* **5**, 115–133 (1943), cf. page 25.
90. BHADSHIA, H. Neural Networks in Materials Science, *ISIJ International* **39** (10), 966–979 (1999), cf. page 25.
91. ROSENBLATT, F. The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain, *Psychological Review* **65** (6), 386–408 (1958), cf. page 27.
92. RUMELHART, D. E., HINTON, G. E. & WILLIAMS, R. J. Foundations. *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition* (éds. RUMELHART, D. E. & MCCLELLAND, J. L.) 318–362, The MIT Press, Cambridge (1986), ISBN : 978-0-262-68053-0, cf. page 27.
93. COOL, T., BHADSHIA, H. K. D. H. & MACKAY, D. J. C. The yield and ultimate tensile strength of steel weld metals, *Materials Science and Engineering A* **223** (1–2), 186–200 (1997), cf. page 27.
94. BADMOS, A. Y. & BHADSHIA, H. K. D. H. Tensile properties of mechanically alloyed oxide dispersion strengthened iron alloys Part 1 — Neural network models, *Materials Science and Technology* **14** (8), 793–809 (1998), cf. pages 27, 28.
95. METZBOWER, E. A., DELOACH, J. J., LALAM, S. H. & BHADSHIA, H. K. D. H. Neural network analysis of strength and ductility of welding alloys for high strength low alloy shipbuilding steels, *Science and Technology of Welding and Joining* **6** (2), 116–124 (2001), cf. pages 27, 28.
96. DATTA, S., PETTERSSON, F., GANGULY, S. & SAXÉN, H. Designing High Strength Multi-phase Steel for Improved Strength-Ductility Balance Using Neural Networks and Multi-objective Genetic Algorithms, *ISIJ International* **47** (8), 1195–1203 (2007), cf. page 27.
97. JOO, M., RYU, J. & BHADSHIA, H. K. D. H. Domains of steels with identical properties, *Materials and Manufacturing Processes* **24**, 53–58 (2009), cf. pages 27, 42.
98. REDDY, N. S., KRISHNAIAH, J., HONG, S. G. & LEE, J. S. Modeling medium carbon steels by using artificial neural networks, *Materials Science and Engineering: A* **508** (1–2), 93–105 (2009), cf. pages 27, 28.
99. MOHANTY, I., BHATTACHARJEE, D. & DATTA, S. Designing cold rolled IF steel sheets with optimized tensile properties using ANN and GA, *Computational Materials Science* **50** (8), 2331–2337 (2011), cf. pages 27, 43.
100. DEY, S., SULTANA, N., KAISER, M. S., DEY, P. & DATTA, S. Computational intelligence based design of age-hardenable aluminium alloys for different temperature regimes, *Materials and Design* **92**, 522–534 (2016), cf. pages 28, 43.
101. DI MARTINO, I., BROOKS, J. W., REED, P. A. S., HOLDWAY, P. & WISBEY, A. Adaptive numerical modelling of high temperature strength, creep and fatigue behaviour in Ni based superalloys, *Materials Science and Technology* **23** (12), 1402–1407 (2007), cf. page 28.

102. GRYLLS, R. J. [Mechanical properties of a high-strength cupronickel alloy — Bayesian neural network analysis](#), *Materials Science and Engineering: A* **234-236**, 267–270 (1997), cf. page 28.
103. SOURMAIL, T., BHADSHIA, H. K. D. H. & MACKAY, D. J. C. [Neural network model of creep strength of austenitic stainless steels](#), *Materials Science and Technology* **18** (6), 655–663 (2002), cf. page 28.
104. VENKATESH, V. [A neural network approach to elevated temperature creep-fatigue life prediction](#), *International Journal of Fatigue* **21** (3), 225–234 (1999), cf. page 28.
105. MURUGANANTH, M. [Metaheuristic Multiobjective Optimization in Steel Welds](#), *Materials and Manufacturing Processes* **24** (2), 230–239 (2009), cf. pages 28, 43.
106. MALINOV, S., SHA, W. & MCKEOWN, J. J. [Modelling the correlation between processing parameters and properties in titanium alloys using artificial neural network](#), *Computational Materials Science* **21** (3), 375–394 (2001), cf. page 28.
107. FUJII, H., MACKAY, D. J. C. & BHADSHIA, H. K. D. H. [Bayesian neural network analysis of fatigue crack growth rate in nickel base superalloys](#), *ISIJ international* **36** (11), 1373–1382 (1996), cf. page 28.
108. MALINOV, S. & SHA, W. [Application of artificial neural networks for modelling correlations in titanium alloys](#), *Materials Science and Engineering A* **365** (1–2), 202–211 (2004), cf. pages 28, 29.
109. GAVARD, L., BHADSHIA, H. K. D. H., MACKAY, D. J. C. & SUZUKI, S. [Bayesian neural network model for austenite formation in steels](#), *Materials Science and Technology* **12** (6), 453–463 (1996), cf. page 28.
110. VERMEULEN, W. G., MORRIS, P. F., de WEIJER, A. P. & van der ZWAAG, S. [Prediction of martensite start temperature using artificial neural networks](#), *Ironmaking and Steelmaking* **23** (5), 433–437 (1996), cf. page 28.
111. SOURMAIL, T. & GARCIA-MATEO, C. [A model for predicting the \$M_s\$ temperatures of steels](#), *Computational Materials Science* **34** (2), 213–218 (2005), cf. page 28.
112. GARCIA-MATEO, C., CAPDEVILA, C., CABALLERO, F. G. & DE ANDRÉS, C. G. [Artificial neural network modeling for the prediction of critical transformation temperatures in steels](#), *Journal of Materials Science* **42** (14), 5391–5397 (2007), cf. page 28.
113. KEMP, R., COTTRELL, G. A., BHADSHIA, H. K. D. H., ODETTE, G. R., YAMAMOTO, T. & KISHIMOTO, H. [Neural-network analysis of irradiation hardening in low-activation steels](#), *Journal of Nuclear Materials* **348** (3), 311–328 (2006), cf. page 28.
114. COTTRELL, G. A., KEMP, R., BHADSHIA, H. K. D. H., ODETTE, G. R. & YAMAMOTO, T. [Neural network analysis of Charpy transition temperature of irradiated low-activation martensitic steels](#), *Journal of Nuclear Materials* **367-370**, 603–609 (2007), cf. page 28.
115. ICHIKAWA, K., BHADSHIA, H. K. D. H. & MACKAY, D. J. C. [Model for Solidification Cracking in Low Alloy Steel Weld Metals](#), *Science and Technology of Welding and Joining* **1** (1), 43–50 (1996), cf. page 28.
116. VASUDEVAN, M., BHADURI, A. K., RAJ, B. & RAO, K. P. [Artificial neural network modelling of solidification mode in austenitic stainless steel welds](#), *Materials Science and Technology* **23** (4), 451–459 (2007), cf. page 28.
117. CHATTERJEE, S., MURUGANANTH, M. & BHADSHIA, H. K. D. H. [\$\delta\$ TRIP steel](#), *Materials Science and Technology* **23** (7), 819–827 (2007), cf. pages 28, 42.

118. MOUSAVI ANIJ DAN, S. H. & BAHRAMI, A. A new method in prediction of TCP phases formation in superalloys, *Materials Science and Engineering A* **396** (1–2), 138–142 (2005), cf. page 28.
119. PEET, M. J., HASAN, H. S. & BHADSHIA, H. K. D. H. Prediction of thermal conductivity of steel, *International Journal of Heat and Mass Transfer* **54** (11–12), 2602–2608 (2011), cf. page 29.
120. XIA, X., NIE, J. F., DAVIES, C. H. J., TANG, W. N., XU, S. W. & BIRBILIS, N. An artificial neural network for predicting corrosion rate and hardness of magnesium alloys, *Materials & Design* **90**, 1034–1043 (2016), cf. page 29.
121. MAC KAY, D. J. C. Probable networks and plausible predictions — a review of practical Bayesian methods for supervised neural networks, *Network: Computation in Neural Systems* **6** (3), 469–505 (1995), cf. page 29.
122. MAC KAY, D. J. C. A Practical Bayesian Framework for Backpropagation Networks, *Neural Computation* **4** (3), 448–472 (1992), cf. pages 29, 35.
123. KOZA, J. R. Genetic programming: on the programming of computers by means of natural selection, The MIT Press, Cambridge (1992), ISBN : 978-0-262-11170-6, cf. page 29.
124. KOVACIC, M., URATNIK, P., BREZOCNIK, M. & TURK, R. Prediction of the Bending Capability of Rolled Metal Sheet by Genetic Programming, *Materials and Manufacturing Processes* **22** (5), 634–640 (2007), cf. page 30.
125. ESKIL, M. & KANCA, E. A new formulation for martensite start temperature of Fe-Mn-Si shape memory alloys using genetic programming, *Computational Materials Science* **43** (4), 774–784 (2008), cf. page 30.
126. DIMITRIU, R. C., BHADSHIA, H. K. D. H., FILLON, C. & POLONI, C. Strength of Ferritic Steels: Neural Networks and Genetic Programming, *Materials and Manufacturing Processes* **24** (1), 10–15 (2009), cf. page 31.
127. SMOLA, A. Regression estimation with support vector learning machines, thèse de master, Technische Universität München (1996), cf. page 31.
128. BOSER, B. E., GUYON, I. M. & VAPNIK, V. N. A Training Algorithm for Optimal Margin Classifiers, *Proceedings of the Fifth Annual ACM Workshop on Computational Learning Theory — COLT'92*, 144–152, Association for Computing Machinery, New York, NY (1992), cf. pages 31, 32.
129. SMOLA, A. J. & SCHOLKOPF, B. A tutorial on support vector regression, *Statistics and Computing* **14** (3), 199–222 (2004), cf. pages 31, 32.
130. FEMMINELLA, O. P., STARINK, M. J., GUNN, S. R., HARRIS, C. J. & REED, P. A. S. Neuro-fuzzy and SUPANOVA Modelling of Structure-Property Relationships in Al-Zn-Mg-Cu Alloys, *Materials Science Forum* **331-337**, 1255–1260 (2000), cf. page 32.
131. FANG, S. F., WANG, M. P. & SONG, M. An approach for the aging process optimization of Al-Zn-Mg-Cu series alloys, *Materials and Design* **30** (7), 2460–2467 (2009), cf. page 32.
132. FANG, S. F., WANG, M. P., WANG, Y. H., QI, W. H. & LI, Z. Evolutionary artificial neural network approach for predicting properties of Cu-15Ni-8Sn-0.4Si alloy, *Transactions of Non-ferrous Metals Society of China (English Edition)* **18** (5), 1223–1228 (2008), cf. page 32.
133. WANG, L., MU, Z. & GUO, H. Application of support vector machine in the prediction of mechanical property of steel materials, *Journal of University of Science and Technology Beijing* **13** (6), 512–515 (2006), cf. page 32.

134. PEI, J. F., CAI, C. Z., ZHU, X. J. & WANG, G. L. Investigation on the Processing-Properties of Hot Deformed TA15 Titanium Alloy via Support Vector Regression, *Materials Science Forum* **689**, 134–143 (2011), cf. page 32.
135. RASMUSSEN, C. E. Evaluation of Gaussian processes and other methods for non-linear regression, thèse de doctorat, University of Toronto (1996), cf. page 33.
136. MATHERON, G. *Traité de géostatistique appliquée*, Technip, Paris (1962), cf. page 33.
137. GIBBS, M. N. Bayesian Gaussian processes for regression and classification, thèse de doctorat, University of Cambridge (1998), cf. page 33.
138. RASMUSSEN, C. E. & WILLIAMS, C. K. I. *Gaussian processes for machine learning*, The MIT Press, Cambridge (2006), ISBN : 978-0-262-18253-9, cf. pages 34, 35.
139. DUVENAUD, D. K. Automatic Model Construction with Gaussian Processes, thèse de doctorat, Pembroke College, University of Cambridge (2014), cf. page 34.
140. TANCRET, F., BHADESHIA, H. K. D. H. & MACKEY, D. J. C. Comparison of artificial neural networks with Gaussian processes to model the yield strength of nickel-base superalloys, *ISIJ International* **39** (10), 1020–1026 (1999), cf. page 35.
141. TANCRET, F. & BELLINI, M. Properties, processability and weldability of a novel affordable creep resistant nickel base superalloy, *Materials Science and Technology* **24** (4), 479–487 (2008), cf. page 35.
142. NEAL, R. M. *Bayesian Learning for Neural Networks*, Springer, New York (1996), ISBN : 978-0-387-94724-2, cf. page 35.
143. NABNEY, I. *NETLAB: Algorithms for Pattern Recognition*, Springer, New York (2002), ISBN : 978-1-85233-440-6, cf. pages 36, 79.
144. THE MATHWORKS INC. *MATLAB 2013b*. Natick, MA (2013), cf. pages 36, 161.
145. HOLLAND, J. H. Genetic Algorithms and the Optimal Allocation of Trials, *SIAM Journal on Computing* **2** (2), 88–105 (1973), cf. page 39.
146. HOLLAND, J. H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, University of Michigan Press, Ann Arbor (1975), ISBN : 978-0-262-58111-0, cf. page 39.
147. DARWIN, C. *On the Origin of the Species*, John Murray, London (1859), cf. page 39.
148. PASZKOWICZ, W. Genetic Algorithms, a Nature-Inspired Tool: Survey of Applications in Materials Science and Related Fields: Part II, *Materials and Manufacturing Processes* **28** (7), 708–725 (2013), cf. page 41.
149. XU, W. & van der ZWAAG, S. Property and Cost Optimisation of Novel UHS Stainless Steels via a Genetic Alloy Design Approach, *ISIJ International* **51** (6), 1005–1010 (2011), cf. page 42.
150. PARETO, V. *Manual of Political Economy : A Variorum Translation and Critical Edition*. — réédition de l'ouvrage original daté de 1906, Oxford University Press, Oxford (2013), ISBN : 978-0-19-960795-2, cf. page 42.
151. GOLDBERG, D. E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison-Wesley, Indianapolis, IN (1989), ISBN : 978-0-201-15767-3, cf. page 43.
152. MAHFOUF, M., JAMEI, M., LINKENS, D. A. & TENNER, J. Inverse modelling for optimal metal design using fuzzy specified multi-objective fitness functions, *Control Engineering Practice* **16** (2), 179–191 (2008), cf. page 43.

153. KENNEDY, J. & EBERHART, R. [Particle swarm optimization](#), *Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks, 1942–1948*, Institute of Electrical & Electronics Engineers, New York City, NY (1995), cf. page 44.
154. BOX, G. E. P. & WILSON, K. B. [On the experimental attainment of optimum conditions](#), *Journal of the Royal Statistical Society* **13** (1), 1–45 (1951), cf. page 44.
155. KIRKPATRICK, S., GELATT, C. D. & VECCHI, M. P. [Optimization by Simulated Annealing](#), *Science* **220** (4598), 671–680 (1982), cf. page 44.
156. MAHFOUF, M., CHEN, M. Y. & LINKENS, D. A. [Adaptive Wghted Particle Swarm Optimisation for Multi-objective Optimal Design of Alloy Steels Parallel Problem Solving from Nature](#). *Lecture Notes in Computer Science – Parallel Problem Solving from Nature – PPSN VIII (Eighth International Conference)*, 762–771, Springer-Verlag, Berlin (2004), cf. page 44.
157. DEB, K., PRATAP, A., AGARWAL, S. & MEYARIVAN, T. [A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II](#), *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **6** (2), 182–197 (2002), cf. page 44.
158. CAHON, S., MELAB, N. & TALBI, E.-G. [ParadisEO: A Framework for the Reusable Design of Parallel and Distributed Metaheuristics](#), *Journal of Heuristics* **10** (3), 357–380 (2004), cf. page 44.
159. D’SOUZA, R. G. L., SEKARAN, K. C. & KANDASAMY, A. [Improved NSGA-II Based on a Novel Ranking Scheme](#), *Journal of Computing* **2** (2), 91–95 (2010), cf. page 45.
160. KONAK, A., COIT, D. W. & SMITH, A. E. [Multi-objective optimization using genetic algorithms: A tutorial](#), *Reliability Engineering and System Safety* **91** (9), 992–1007 (2006), cf. page 46.
161. DEB, K. & AGRAWAL, R. B. [Simulated Binary Crossover for Continuous Search Space](#), *Complex Systems* **9**, 115–148 (1995), cf. pages 46, 101.
162. DEB, K. & AGRAWAL, R. B. [Real-coded Genetic Algorithms with Simulated Binary Crossover: Studies on Multimodal and Multiobjective Problems](#), *Complex Systems* **9**, 431–454 (1995), cf. pages 46, 101.
163. DEB, K., SINDHYA, K. & OKABE, T. [Self-adaptive simulated binary crossover for real-parameter optimization](#), *Proceedings of the 9th annual conference on genetic and evolutionary computation – GECCO’07*, 1187–1194 (2007), cf. page 47.
164. ZITZLER, E. & THIELE, L. [Multiobjective evolutionary algorithms: a comparative case study and the strength Pareto approach](#), *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **3** (4), 257–271 (1999), cf. page 47.
165. CORNE, D., KNOWLES, J. D. & OATES, M. [The Pareto envelope-based selection algorithm for multiobjective optimization](#), *Parallel Problem Solving from Nature-PPSN VI*, 839–848 (2000), cf. page 47.
166. REED, P. & DEVIREDDY, V. [Groundwater monitoring design: a case study combining epsilon dominance archiving and automatic parameterization for the NSGA-II](#). *Applications of Multi-Objective Evolutionary Algorithms* 79–100, World Scientific Publishing, Singapore (2004), cf. page 47.
167. LIEFOOGHE, A., JOURDAN, L. & TALBI, E. G. [Metaheuristics and cooperative approaches for the Bi-objective Ring Star Problem](#), *Computers and Operations Research* **37** (6), 1033–1044 (2010), cf. page 47.
168. HAMDY, M., PALONEN, M. & HASAN, A. [Implementation of Pareto-Archive NSGA-II Algorithms To a Nearly-Zero-Energy Building Optimisation Problem](#), *First Building Simulation and Optimization Conference*, 181–188 (2012), cf. page 48.

169. BRANS, J. P. & VINCKE, P. A Preference Ranking Organisation Method: The PROMETHEE Method for Multiple Criteria Decision-Making, *Management Science* **31** (6), 647–656 (1985), cf. page 48.
170. BEHZADIAN, M., KAZEMZADEH, R. B., ALBADVI, A. & AGHDASI, M. PROMETHEE: A comprehensive literature review on methodologies and applications, *European Journal of Operational Research* **200** (1), 198–215 (2010), cf. page 48.
171. BRANS, J. P. & MARESCHAL, B. PROMETHEE Methods. *Multiple Criteria Decision Analysis: State of the Art Surveys*, 163–186, Springer-Verlag, New York (2005), ISBN : 978-0-387-23081-8, cf. pages 48–50.
172. MARESCHAL, B. How to choose the right preference function? En ligne : http://www.promethee-gaia.net/faq-pro/?action=article&cat_id=003002&id=4&lang= (visité le 06/06/2016) (2012), cf. page 49.
173. VENKATA RAO, R. & PATEL, B. K. Decision making in the manufacturing environment using an improved PROMETHEE method, *International Journal of Production Research* **48** (16), 4665–4682 (2010), cf. page 49.
174. MAITY, S. R. & CHAKRABORTY, S. Tool steel material selection using PROMETHEE II method, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology* **78** (9-12), 1537–1547 (2015), cf. page 50.
175. CHATTERJEE, P. & CHAKRABORTY, S. Material selection using preferential ranking methods, *Materials & Design* **35**, 384–393 (2012), cf. page 50.
176. ÇALIŞKAN, H., KURŞUNCU, B., KURBANOĞLU, C. & GÜVEN, S. Y. Material selection for the tool holder working under hard milling conditions using different multi criteria decision making methods, *Materials and Design* **45**, 473–479 (2013), cf. page 50.
177. ANOJKUMAR, L., ILANGKUMARAN, M. & SASIREKHA, V. Comparative analysis of MCDM methods for pipe material selection in sugar industry, *Expert Systems with Applications* **41** (6), 2964–2980 (2014), cf. page 51.
178. PENG, A. H. & XIAO, X. M. Material selection using PROMETHEE combined with analytic network process under hybrid environment, *Materials and Design* **47**, 643–652 (2013), cf. page 51.
179. ZELENY, M. Multiple Criteria Decision Making (MCDM): From Paradigm Lost to Paradigm Regained? *Journal of Multi-Criteria Decision Analysis* **18** (1–2), 77–89 (2011), cf. page 51.
180. COELLO, C. A. C., LAMONT, G. B. & VAN VELDHIJZEN, D. A. *Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems Second Edition*, Springer US, New York (2007), ISBN : 978-0-387-33254-3, cf. pages 51, 100, 101.
181. SIMS, C. T. A History of Superalloy Metallurgy for Superalloy Metallurgists, *Superalloys 1984 (Fifth International Symposium)*, 399–419, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (1984), cf. page 65.
182. STEIN-BRZOZOWSKA, G., FLÓREZ, D. M., MAIER, J. & SCHEFFKNECHT, G. Nickel-base superalloys for ultra-supercritical coal-fired power plants: Fireside corrosion. Laboratory studies and power plant exposures, *Fuel* **108**, 521–533 (2013), cf. page 65.
183. DUPONT, J. N., LIPPOLD, J. C. & KISER, S. D. *Welding metallurgy and weldability of nickel-base alloys*, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey (2009), ISBN : 978-0-470-08714-5, cf. pages 66, 67, 71, 72, 74.
184. MORBIOLI, R. & WALTER, P. *Corrosion des superalliages : cas des aubes de turbines. Corrosion des matériaux à haute température* Éditions de Physique, Les Ulis (1987), ISBN : 978-2-86883-053-1, cf. pages 66, 76.

185. REED, R. C. *The Superalloys: Fundamentals and Applications*, Cambridge University Press, Cambridge (2006), ISBN : 978-0-521-07011-9, cf. pages 66, 67, 69, 70, 98.
186. JENA, A. K. & CHATURVEDI, M. C. The role of alloying elements in the design of nickel-base superalloys, *Journal of Materials Science* **19** (10), 3121–3139 (1984), cf. page 67.
187. MANIAR, G. N. & BRIDGE, J. E. Effect of gamma-gamma prime mismatch, volume fraction gamma prime, and gamma prime morphology on elevated temperature properties of Ni, 20 Cr, 5.5 Mo, Ti, Al alloys, *Metallurgical Transactions* **2** (1), 95–102 (1971), cf. pages 68, 98.
188. *Superalloys II: High-Temperature Materials for Aerospace and Industrial Power* (éds. SIMS, C. T., STOLOFF, N. S. & HAGEL, W. C.) John Wiley & Sons, Hoboken, NJ (1987), ISBN : 978-0-471-01147-7, cf. pages 68, 70, 71.
189. XU, Y., ZHANG, L., LI, J., XIAO, X., CAO, X., JIA, G. & SHEN, Z. Relationship between Ti/Al ratio and stress-rupture properties in nickel-based superalloy, *Materials Science and Engineering A* **544**, 48–53 (2012), cf. page 68.
190. BOUSE, G. K. Eta and platelet phases in investment cast superalloys, *Superalloys 1996 (Eighth International Symposium)*, 163–172, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (1996), cf. page 68.
191. SHINGLEDECKER, J. P. & PHARR, G. M. The role of eta phase formation on the creep strength and ductility of Inconel alloy 740 at 1023 K (750 °C), *Metallurgical and Materials Transactions A* **43** (6), 1902–1910 (2012), cf. page 68.
192. DAVIS, J. R. *Nickel, Cobalt, and Their Alloys*, American Society for Metals, Materials Park, OH (2000), ISBN : 978-0-87170-685-0, cf. page 70.
193. BRINK, C. & SHOEMAKER, D. P. A variation on the σ -phase structure: the crystal structure of the P phase, Mo–Ni–Cr, *Acta Crystallographica* **8** (11), 734–735 (1955), cf. page 70.
194. SHI, Q., HUO, J., CAO, L., LI, J., DING, X., ZHENG, Y. & FENG, Q. Compositional effect on TCP phase formation in Ru-containing Ni-based single crystal superalloys, *MATEC Web of Conferences* **14**, 1–6 (2014), cf. page 70.
195. RAE, C. M. F., KARUNARATNE, M. S. A., SMALL, C. J., BROOMFIELD, R. W., JONES, C. N. & REED, R. C. Topologically close packed phases in an experimental rhenium-containing single crystal superalloy, *Superalloys 2000 (Ninth International Symposium)*, 767–776, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (2000), cf. page 70.
196. BOESCH, W. J. & SLANEY, J. S. Preventing sigma phase embrittlement in nickel base superalloys, *Metal Progress* **86** (1), 109–111 (1964), cf. page 70.
197. WOODYATT, L. R., SIMS, C. T. & BEATTIE, H. J. The Prediction of Sigma-Type Phase Occurrence from Compositions in Austenitic Superalloys, *Transactions of the Metallurgical Society of AIME* **236**, 519, American Institute of Mining, Metallurgical, and Petroleum Engineers, New York (1966), cf. page 70.
198. MORINAGA, M., YUKAWA, N., ADACHI, H. & EZAKI, H. NEW PHACOMP and its Applications to Alloy Design, *Superalloys 1984 (Fifth International Symposium)*, 523–532, The Minerals, Metals et Materials Society, Warrendale, PA (1984), cf. page 71.
199. SAINDRENAN, G., LE GALL, R. & CHRISTIEN, F. *Endommagement interfacial des métaux : ségrégation interfaciale et conséquences* (éd. ELLIPSES) Paris (2002), ISBN : 978-2-7298-0911-9, cf. page 71.
200. RAPPAZ, M., DREZET, J. M. & GREMAUD, M. A new hot-tearing criterion, *Metallurgical and Materials Transactions A* **30** (2), 449–455 (1999), cf. page 72.

201. RINDLER, W., KOZESCHNIK, E. & BUCHMAYR, B. Computer simulation of the brittle-temperature-range (BTR) for hot cracking in steels, *Steel Research* **71** (11), 460–465 (2000), cf. page 73.
202. TILLACK, D. J. Nickel alloys and stainless steels for elevated temperature service : weldability considerations, *Proceedings from Materials Solutions 97 on Joining and Repair of Gas Turbine Components*, American Society for Metals, Indianapolis, IN (1997), cf. page 74.
203. PRAGER, M. & SHIRA, C. S. *Welding of precipitation-hardening nickel base alloys*, Welding Research Council, New York (1968), ISBN : 978-1-58145-127-6, cf. page 75.
204. GEORGE, S. & ERIC, J. W. Superalloys with improved oxidation resistance and weldability, US Patent N°6177046. (1998), cf. page 75.
205. SRINIVASAN, V. S., CHOUDHARY, B. K., MATHEW, M. D. & JAYAKUMAR, T. Long-term creep-rupture strength prediction for modified 9Cr–1Mo ferritic steel and type 316L(N) austenitic stainless steel, *Materials at High Temperatures* **29** (1), 41–48 (2012), cf. page 89.
206. YOSHITAKE, S. & NARAYAN, V. Data Library MAP_DATA_LATTMISFIT. En ligne : <http://www.msm.cam.ac.uk/map/data/neural/lattmisfit-b.html> (visité le 10/07/2016) (1999), cf. pages 92, 95.
207. HULL, F. C. Estimating Alloy Densities, *Metal Progress* **59**, 139–140 (1969), cf. page 99.
208. GOEL, T. & STANDER, N. A study on the convergence of multiobjective evolutionary algorithms, *Preprint submitted to the 13th AIAA/ISSMO conference on Multidisciplinary Analysis Optimization* (2010), cf. pages 102, 162.
209. THÉBAUD, L., VILLECHAISE, P., CORMIER, J., CROZET, C., DEVAUX, A., BÉCHET, D., FRANCHET, J. M., ORGANISTA, A. & HAMON, F. Relationships between Microstructural Parameters and Time-Dependent Mechanical Properties of a New Nickel-Based Superalloy AD730™, *Metals* **5**, 2236–2251 (2015), cf. page 116.
210. FARINA, M. & AMATO, P. On the optimal solution for many-criteria optimization problems, *Proceedings of the 2002 Annual Meeting of the North American Fuzzy Information Processing Society NAFIPS-FLINT 2002*, 233–238, Institute of Electrical & Electronics Engineers (2002), cf. pages 123, 206.
211. ISHIBUCHI, H., TSUKAMOTO, N. & NOJIMA, Y. Evolutionary many-objective optimization: A short review, *2008 IEEE Congress on Evolutionary Computation, CRC 2008*, 2419–2426, Institute of Electrical & Electronics Engineers, New York City, NY (2008), cf. page 123.
212. DEB, K. & SAXENA, D. Searching for Pareto-optimal solutions through dimensionality reduction for certain large-dimensional multi-objective optimization problems, *Proceedings of the World Congress on Computational Intelligence (WCCI-2006)*, 3352–3360 (2006), cf. page 123.
213. GANDY, D. & SHINGLEDECKER, J. *Advances in Materials Technology for Fossil Power Plants: Proceedings from the Seventh International Conference*, American Society for Metals, Materials Park, OH (2014), ISBN : 978-1-62708-060-6, cf. page 125.
214. XISHAN, X., CHI, C., YU, Q., YAO, Z., ZHANG, M., HU, Y., DONG, J., YU, H., ZHAO, S., LIN, F., LIU, X., MEI, L., YANG, H. & LI, M. An investigation on structure stability of advanced austenitic heat-resisting steels and Ni-base superalloys for 600-700 °C A-USC power plant application, *Advances in Materials Technology for Fossil Power Plants: Proceedings from the Seventh International Conference*, 98–119, American Society for Metals, Materials Park, OH (2014), ISBN : 978-1-62708-060-6, cf. page 126.

215. MATYSIAK, H., ZAGORSKA, M., ANDERSSON, J., BALKOWIEC, A., CYGAN, R., RASINSKI, M., PI-SAREK, M., ANDRZEJCZUK, M., KUBIAK, K. & KURZYDLOWSKI, K. [Microstructure of Haynes® 282® Superalloy after Vacuum Induction Melting and Investment Casting of Thin-Walled Components](#), *Materials* **6** (11), 5016–5037 (2013), cf. page 126.
216. ZHAO, J. C., RAVIKUMAR, V. & BELTRAN, A. M. [Phase precipitation and phase stability in Nimonic 263](#), *Metallurgical and Materials Transactions A* **32** (6), 1271–1282 (2001), cf. page 128.
217. VARALAKSHMI, S., KAMARAJ, M. & MURTY, B. S. [Processing and properties of nanocrystalline CuNiCoZnAlTi high entropy alloys by mechanical alloying](#), *Materials Science and Engineering A* **527** (4–5), 1027–1030 (2010), cf. page 147.
218. CANTOR, B., CHANG, I. T. H., KNIGHT, P. & VINCENT, A. J. B. [Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys](#), *Materials Science and Engineering A* **375–377**, 213–218 (2004), cf. page 147.
219. VINCENT, A. J. B. A study of three multicomponent alloys, thèse de licence, University of Sussex (1981), cf. page 147.
220. HUANG, K. H. A study on multicomponent alloy systems containing equal-mole elements, thèse de master, National Tsing Hua University (1996), cf. page 147.
221. ZHANG, Y., ZHOU, Y. J., LIN, J. P., CHEN, G. L. & LIAW, P. K. [Solid-solution phase formation rules for multi-component alloys](#), *Advanced Engineering Materials* **10** (6), 534–538 (2008), cf. pages 148–150, 152, 154.
222. PICKERING, E. J. & JONES, N. G. [High-entropy alloys: a critical assessment of their founding principles and future prospects](#), *International Materials Reviews* **61** (3), 183–202 (2016), cf. page 148.
223. HUME-ROTHERY, W. [Atomic Theory for Students of Metallurgy](#) — 5th reprint, The Institute of Metals, London (1969), ISBN : 978-0-901462-39-8, cf. page 149.
224. FANG, S., XIAO, X., XIA, L., LI, W. & DONG, Y. [Relationship between the widths of super-cooled liquid regions and bond parameters of Mg-based bulk metallic glasses](#), *Journal of Non-Crystalline Solids* **321** (1-2), 120–125 (2003), cf. page 149.
225. GUO, S. & LIU, C. T. [Phase stability in high entropy alloys: Formation of solid-solution phase or amorphous phase](#), *Progress in Natural Science: Materials International* **21** (6), 433–446 (2011), cf. pages 149, 150, 152–154.
226. GUO, S., NG, C., LU, J. & LIU, C. T. [Effect of valence electron concentration on stability of fcc or bcc phase in high entropy alloys](#), *Journal of Applied Physics* **109** (10) (2011), cf. pages 150, 152.
227. POLETTI, M. G. & BATTEZZATI, L. [Electronic and thermodynamic criteria for the occurrence of high entropy alloys in metallic systems](#), *Acta Materialia* **75**, 297–306 (2014), cf. pages 150–154.
228. MIZUTANI, U. [Hume-Rothery Rules for Structurally Complex Alloy Phases](#), CRC Press, Boca Raton, FL (2010), ISBN : 978-1-4200-9058-1, cf. page 150.
229. YEH, J. W., LIN, S. J., CHIN, T. S., GAN, J. Y., CHEN, S. K., SHUN, T. T., TSAU, C. H. & CHOU, S. Y. [Formation of simple crystal structures in Cu-Co-Ni-Cr-Al-Fe-Ti-V alloys with multiprincipal metallic elements](#), *Metallurgical and Materials Transactions A* **35** (8), 2533–2536 (2004), cf. page 150.
230. MIEDEMA, A. R., de CHÂTEL, P. F. & de BOER, F. R. [Cohesion in alloys — fundamentals of a semi-empirical model](#), *Physica* **100** (1), 1–28 (1980), cf. page 150.

231. YANG, X. & ZHANG, Y. Prediction of high-entropy stabilized solid-solution in multi-component alloys, *Materials Chemistry and Physics* **132** (2–3), 233–238 (2012), cf. pages 151, 154.
232. TODA-CARABALLO, I. & RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. A criterion for the formation of high entropy alloys based on lattice distortion, *Intermetallics* **71**, 76–87 (2016), cf. pages 151–154, 156, 157, 159–161, 171, 178.
233. ASENSIO DOMÍNGUEZ, L., GOODALL, R. & TODD, I. Prediction and validation of quaternary high entropy alloys using statistical approaches, *Materials Science and Technology* **31** (10), 1201–1206 (2015), cf. page 153.
234. TODA-CARABELLO, I. Designing high entropy alloys employing thermodynamics and Gaussian process statistical analysis. Travail non-publié (2016), cf. page 155.
235. TANCRET, F. Designing high entropy alloys employing thermodynamics and Gaussian process statistical analysis. Travail non-publié (2016), cf. pages 155–158.
236. ZHANG, C., ZHANG, F., CHEN, S. & CAO, W. Computational thermodynamics aided high-entropy alloy design, *Journal of Materials* **64** (7), 839–845 (2012), cf. page 157.
237. RAGHAVAN, R., HARI KUMAR, K. C. & MURTY, B. S. Analysis of phase formation in multi-component alloys, *Journal of Alloys and Compounds* **544**, 152–158 (2012), cf. page 157.
238. PanHEA — Thermodynamic database for multi-component high entropy alloys. En ligne : <http://www.computherm.com/download/database2016/PanHEA.pdf> (visité le 22/07/2016), cf. page 157.
239. Thermo-Calc Software TCHEA High Entropy Alloy Database version 1.0. En ligne : http://www.thermocalc.com/media/35873/tchea10_extended_info_bh.pdf (visité le 06/05/2016), cf. page 157.
240. TODA-CARABALLO, I. & RIVERA-DÍAZ-DEL-CASTILLO, P. E. J. Modelling solid solution hardening in high entropy alloys, *Acta Materialia* **85**, 14–23 (2015), cf. page 160.
241. FRIEDRICH, T. & WAGNER, M. Seeding the initial population of multi-objective evolutionary algorithms: A computational study, *Applied Soft Computing Journal* **33**, 223–230 (2015), cf. page 161.
242. DEB, K. A Robust Evolutionary Framework for Multi-Objective Optimization, *Proceedings of the 10th annual conference on genetic and evolutionary computation — GECCO'08*, 633–640, Association for Computing Machinery, New York, NY (2008), cf. page 162.
243. DREWES, R., LOUIS, S., MILES, C., McDONNELL, J. & GIZZI, N. Use of case injection to bias genetic algorithm solutions of similar problems, *The 2003 Congress on Evolutionary Computation — CEC'03*, Institute of Electrical & Electronics Engineers (IEEE), New York City, NY (2003), cf. page 165.
244. HORNBY, G. S. ALPS: The Age-Layered Population Structure for Reducing the Problem of Premature Convergence, *Proceedings of the 8th annual conference on genetic and evolutionary computation — GECCO'06*, Association for Computing Machinery (ACM) (2006), cf. page 165.
245. FRACZKIEWICZ, A. Metal alloy used to make metal part, comprises chromium, nickel, manganese, cobalt, iron and optionally secondary components, Brevet FR 3 026 748-A1. (2016), cf. page 177.
246. ASHBY, M. *Materials Selection in Mechanical Design, Fourth Edition*, Butterworth-Heinemann, Oxford, United Kingdom (2010), ISBN : 978-1-85617-663-7, cf. pages 199, 200.

247. GAO, M. C., YEH, J. W., LIAW, P. K. & ZHANG, Y. [High-Entropy Alloys: Fundamentals and Applications](#), Springer International Publishing (2016), ISBN : 978-3-319-27011-1, cf. page 201.
248. OLSON, G. B. & COHEN, M. [A general mechanism of martensitic nucleation: Part I. General concepts and the FCC \$\rightarrow\$ HCP transformation](#), *Metallurgical Transactions A* **7**, 1897–1904 (1976), cf. page 201.
249. MIODOWNIK, A. P. [The calculation of stacking fault energies in Fe-Ni-Cr alloys](#), *Calphad* **2**, 207–226 (1978), cf. page 201.
250. ISHIBUCHI, H., MASUDA, H., TANIGAKI, Y. & NOJIMA, Y. [Difficulties in specifying reference points to calculate the inverted generational distance for many-objective optimization problems](#), *2014 IEEE Symposium on Computational Intelligence in Multi-Criteria Decision-Making (MCDM)*, Institute of Electrical & Electronics Engineers (IEEE), New York City, NY (2014), cf. page 206.
251. KARUSH, W. [Minima of Functions of Several Variables with Inequalities as Side Constraints](#), thèse de master, Department of Mathematics, University of Chicago (1939), cf. page 206.
252. KUHN, H. W. & TUCKER, A. W. [Nonlinear Programming](#), *Proceedings of the Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, 481–492, University of California Press, Berkeley, CA (1951), cf. page 206.
253. DEB, K. & JAIN, H. [An Evolutionary Many-Objective Optimization Algorithm Using Reference-Point-Based Nondominated Sorting Approach, Part I: Solving Problems With Box Constraints](#), *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **18**, 577–601 (2014), cf. page 206.
254. YANG, S., LI, M., LIU, X. & ZHENG, J. [A Grid-Based Evolutionary Algorithm for Many-Objective Optimization](#), *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* **17**, 721–736 (2013), cf. page 206.
255. FRIEDMAN, N. & NACHMAN, I. [Gaussian process networks](#), *Proceedings of the Sixteenth conference on Uncertainty in artificial intelligence*, 211–219, Morgan Kaufmann Publishers Inc., Burlington, MA (2000), cf. page 207.
256. NIEVES, J., SANTOS, I., PENYA, Y. K., ROJAS, S., SALAZAR, M. & BRINGAS, P. G. [Mechanical Properties Prediction in High-Precision Foundry Production](#), *Proceedings of the 7th IEEE International Conference on Industrial Informatics (INDIN)*, 31–36, Institute of Electrical & Electronics Engineers, New York City, NY (2009), cf. page 207.
257. WAGNER, C. [Reaktionstypen bei der Oxydation von Legierungen](#), *Zeitschrift für Elektrochemie* **63** (7), 772–782 (1959), cf. page 207.
258. BENSCH, M., SATO, A., WARNKEN, N., AFFELDT, E., REED, R. C. & GLATZEL, U. [Modelling of High Temperature Oxidation of Alumina-Forming Single-Crystal Nickel-Base Superalloys](#), *Acta Materialia* **60**, 5468–5480 (2012), cf. page 207.
259. POQUILLON, D. & MONCEAU, D. [Application of a Simple Statistical Spalling Model for the Analysis of High-Temperature, Cyclic-Oxidation Kinetics Data](#), *Oxidation of Metals* **59**, 409–431 (2003), cf. page 207.
260. FIRSTOV, G., KOSORUKOVA, T., KOVAL, Y. & ODNOSUM, V. [High Entropy Shape Memory Alloys](#), *Materials Today : Proceedings* **2**, S499–S503 (2015), cf. page 209.
261. HE, J. Y., WANG, H., HUANG, H. L., XU, X. D., CHEN, M. W., WU, Y., LIU, X. J., NIEH, T. G., AN, K. & LU, Z. P. [A precipitation-hardened high-entropy alloy with outstanding tensile properties](#), *Acta Materialia* **102**, 187–196 (2016), cf. page 209.

-
262. Le chiffre du commerce extérieur — Direction générale des douanes. En ligne : <http://lekiosque.finances.gouv.fr/> (visité le 23/08/2016), cf. page 209.
263. Report on critical raw materials for the EU. Report of the *Ad hoc* Working Group on defining critical raw materials. En ligne : <http://ec.europa.eu/DocsRoom/documents/10010/attachments/1/translations/en/renditions/pdf> (visité le 23/08/2016) (Commission Européenne, 2014) cf. page 209.

Thèse de Doctorat

Edern MENU

Conception d'alliages par optimisation combinatoire multiobjectifs :

thermodynamique prédictive, fouille de données, algorithmes génétiques et analyse décisionnelle

Designing new alloys through multiobjective combinatorial optimisation:

computational thermodynamics, data mining, genetic algorithms and decision analysis

Ce travail a pour objet le développement d'un système combinant un algorithme génétique d'optimisation multiobjectifs avec des outils de thermodynamique prédictive de type CALPHAD (calcul des diagrammes de phases) et de fouille de données permettant l'estimation des propriétés thermochimiques et thermomécaniques d'alliages multicomposants. L'intégration de ces techniques permet l'optimisation quasi-autonome de la composition d'alliages complexes vis-à-vis de plusieurs critères antagonistes telles les résistances mécaniques et chimiques, la stabilité microstructurale à haute température et le coût. La méthode est complétée d'une technique d'analyse décisionnelle multicritères pour assister la sélection d'alliages. L'approche est illustrée par l'optimisation de la chimie de deux familles d'alliages multicomposants. Le premier cas d'étude porte sur les superalliages à base de nickel polycristallins corroyés renforcés par précipitation de la phase γ' destinés à la fabrication de disques de turbines dans l'aéronautique ou de tuyauteries de centrales thermiques. L'optimisation résulte en la conception d'alliages moins onéreux et prédits plus résistants que l'Inconel 740H et le Haynes 282, deux superalliages de dernière génération. Le second cas d'étude concerne les alliages dits « à forte entropie » dont la métallurgie singulière est emblématique des problèmes combinatoires. À l'issue de l'optimisation, quelques alliages à forte entropie ont été sélectionnés et fabriqués; leur caractérisation expérimentale préliminaire met en évidence des propriétés attrayantes tel un ratio dureté sur masse volumique inédit.

Mots-clés : Thermo-Calc, apprentissage supervisé, processus gaussiens, réseaux de neurones artificiels, aide à la décision multicritères, PROMETHEE, HEA

The present work revolves around the development of an integrated system combining a multi-objective genetic algorithm with CALPHAD-type computational thermodynamics (calculations of phase diagrams) and data mining techniques enabling the estimation of thermochemical and thermomechanical properties of multi-component alloys. This integration allows the quasi-autonomous chemistry optimisation of complex alloys against antagonistic criteria such as mechanical and chemical resistance, high-temperature microstructural stability, and cost. Further alloy selection capability is provided by a multi-criteria decision analysis technique. The proposed design methodology is illustrated on two multicomponent alloy families. The first case study relates to the design of wrought, polycrystalline γ' -hardened nickel-base superalloys intended for aerospace turbine disks or tubing applications in the energy industry. The optimisation leads to the discovery of novel superalloys featuring lower costs and higher predicted strength than Inconel 740H and Haynes 282, two state-of-the-art superalloys. The second case study concerns the so-called "high-entropy alloys" whose singular metallurgy embodies typical combinatorial issues. Following the optimisation, several high-entropy alloys are produced; preliminary experimental characterisation highlights attractive properties such as an unprecedented hardness to density ratio.

Keywords: Thermo-Calc, supervised learning, Gaussian processes, artificial neural networks, multi-criteria decision analysis, PROMETHEE, HEA