

Développement d'une méthodologie d'optimisation inverse robuste pour la conception de nouvelles nuances d'acier

Contexte et objectif global du projet :

Les processus de développement de nouveaux matériaux tels que les alliages métalliques sont souvent très longs et ne garantissent nécessairement ni une bonne exploration du domaine de conception, ni l'obtention de matériaux aux performances maximisées (bien que répondant au cahier des charges initial). Afin de rester compétitifs dans un contexte sociétal volatile, complexe et incertain, les industries françaises doivent donc enrichir leurs méthodologies actuelles pour raccourcir les temps de développement, de la conception des matériaux à leur mise sur le marché, et ainsi s'inscrire dans une démarche de frugalité pour réduire les gaspillages liés à la surconsommation de matières. La thèse proposée s'inscrit dans ce contexte, avec pour objectif global de **développer des méthodes et outils pour la conception virtuelle de matériaux**. Elle sera réalisée en partenariat avec Aubert & Duval, entreprise spécialisée dans les produits métallurgiques de hautes performances pour de nombreux secteurs d'activité stratégiques comme l'aéronautique, la défense ou l'énergie.

Verrous et objectifs scientifiques et technologiques des travaux de thèse :

La thèse s'intéressera plus particulièrement au processus de développement d'une nuance d'acier, dont la mise en œuvre s'appuie sur trois étapes :

- **l'élaboration** de produits bruts, nommés lingots, à partir d'une composition chimique cible, c'est-à-dire la liste des éléments chimiques nécessaires pour produire le matériau,
- **la transformation** des lingots en demi-produit (barre, billette) puis potentiellement en produit fini (matriçage, estampage...),
- **le traitement thermique**, qui complète la série de changements microstructuraux nécessaires pour obtenir les propriétés d'usage cibles telles que les résistances mécaniques et thermiques, la ténacité et la tenue à la corrosion et à l'oxydation.

A l'issue de ces étapes de transformation de la matière, diverses mesures sont réalisées sur les produits, d'une part à l'échelle de la microstructure (taille et distribution de grains, pourcentages de phases, caractérisation de la propreté inclusionnaire, des ségrégations, etc.), et d'autre part à l'échelle macroscopique, qui est celle des propriétés d'usage.

Ce processus de développement matériau est globalement très complexe et nécessite plusieurs itérations avant de converger vers le cahier des charges client.

Les propriétés d'usage observées sur les produits finis sont naturellement intimement liées à la composition chimique de l'alliage, mais aussi aux paramètres des procédés de transformation et traitements thermiques mis en œuvre lors de la production à l'échelle industrielle. Bien que l'on puisse imaginer qu'il existe théoriquement une solution optimale globale du triptique – **composition chimique, paramètres des procédés et traitements thermiques** –, sa recherche est extrêmement difficile, voire impossible en pratique en raison des coûts associés. Ceci est en partie dû à la topologie et à l'étendue du domaine de conception à explorer ainsi qu'à la complexité des phénomènes mis en jeu. Cette difficulté est accentuée par les nombreuses variabilités en présence. Des écarts entre la composition chimique cible de la nuance et celles obtenues sur les produits sont par exemple observés. Il existe aussi des incertitudes sur les paramètres des procédés utilisés et des dispersions sont enfin mesurées sur les propriétés d'usage finales. **La compréhension des liens intrinsèques entre les différentes étapes, leur dépendance et le transport des incertitudes, constitue ainsi un verrou majeur pour répondre à la problématique.**

Lever ce verrou est un objectif global à long terme pour tous les concepteurs matériaux. Ces travaux s'inscrivent dans ce cadre en focalisant ici sur la **mise en place d'une méthodologie de conception de nuances d'aciers à partir de la mesure de propriétés au niveau des microstructures (échelle intermédiaire) et des propriétés d'usage**. Il s'agit donc d'apprendre la relation inverse propriétés – paramètres process, voir figure 1, et donc de se placer dans un contexte d'ingénierie inverse.

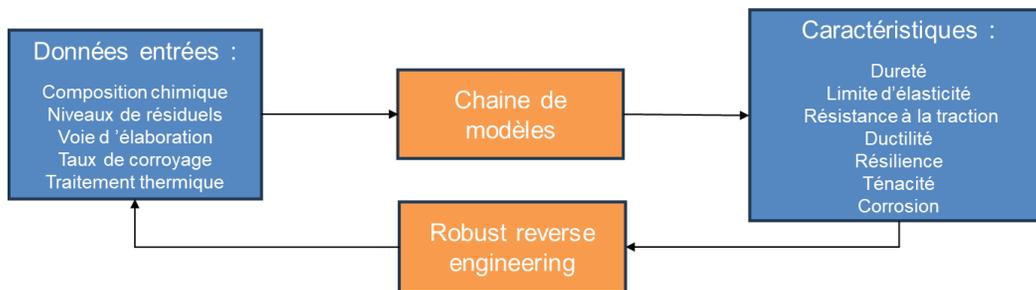


Figure 1 : Approche d'ingénierie inverse pour la conception matériau

Pour ce faire, des modélisations des lois phénoménologiques de plusieurs niveaux de fidélité et des règles empiriques métier seront exploités, conjointement avec des données à disposition (compositions chimiques, mesures de certaines propriétés intermédiaires, mesures de certaines propriétés d'usage), issues d'une même famille d'aciers. Les paramètres des procédés d'élaboration, de transformation et de traitements thermiques seront quant à eux considérés comme des éléments de contexte et ne feront pas partis des variables de conception / optimisation.

Un travail de recherche original doit donc être mené pour hybrider les approches physiques et les approches pilotées par les données (contexte de l'apprentissage statistique en intelligence artificielle) afin de résoudre le **problème d'optimisation inverse, multi-objectifs et multicritères, entaché d'incertitudes au niveau de ses entrées et de ses sorties.**

Un tel problème d'optimisation robuste nécessite de lever plusieurs verrous technologiques et méthodologiques. Un premier verrou, d'ordre méthodologique porte sur la formulation hybride de l'approche qui sera proposée, mêlant modèles physiques et modèles de *machine learning* pour tirer parti des deux sources d'information. Un second verrou technologique concerne la mise en place d'une chaîne de simulation *forward and backward* de modèles de différentes natures, multi-échelles, imbriqués et multi-fidélités, voir figure 2, mettant en relation la composition chimique et les propriétés d'usage.

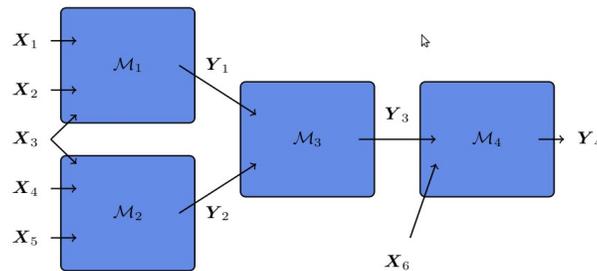


Figure 2 : Exemple de chaîne de modèles imbriqués. Il peut y avoir des modèles physiques, de différents niveaux de fidélité et des modèles d'apprentissage statistique.

Un troisième verrou, d'ordre méthodologique, est quant à lui directement lié au problème d'optimisation inverse à résoudre compte-tenu de la dimension élevée des entrées et des sorties et de leur nature (discrète, continue, etc.), du nombre de fonctions objectifs et critères et des incertitudes à modéliser.

Description et organisation des travaux :

La thèse concourt au développement d'un outil numérique de *virtual testing*, qui, à partir de caractéristiques souhaitées et sous certaines contraintes, permette d'identifier les compositions chimiques les plus prometteuses, afin de concevoir plus efficacement de nouvelles nuances.

Plusieurs tâches sont déjà identifiées :

- Revue bibliographique des méthodologies existantes pour l'élaboration de nuances d'aciers et d'autres matériaux.
- Analyse des bases de données fournies par Aubert & Duval pour extraire les caractéristiques pertinentes et préparer les modèles d'apprentissage.
- Construction de la chaîne numérique de modèles et évaluation de ses performances. Cette chaîne de modèles sera composée de modèles de simulation et de règles empiriques fournis par Aubert & Duval (modèles physiques), mais aussi de modèles de machine learning. Elle devra permettre de prédire des propriétés à différentes échelles (microstructure / propriétés d'usage).
- Mise en place du problème d'optimisation inverse et développement d'algorithmes de résolution spécifiques.

Profil recherché

- Formation d'ingénieur ou master avec de solides bases en statistique et machine learning. Des compétences en science des matériaux et en analyse de données d'essais seraient un plus ;
- Appétence pour la recherche appliquée et la modélisation numérique ;
- Compétences en programmation informatique ;
- Rigueur, autonomie et aptitude au travail en équipe.

Lieu de travail et encadrement

La thèse se déroulera dans les locaux de Phimeca Engineering, site de Cournon-d'Auvergne. Le(la) doctorant(e) sera inscrit(e) au LIMOS (laboratoire de recherche CNRS UMR 6158) à Clermont Ferrand. L'application des méthodologies développées se fera principalement à partir des données fournies par Aubert & Duval.

Les travaux seront encadrés par Jean-Marc Bourinet (LIMOS, co-directeur de thèse), Julien Ah-Pine (LIMOS, co-directeur de thèse), Cécile Mattrand (Institut Pascal, co-encadrante) et Antoine Gomond (Phimeca Engineering, co-encadrant).

Financement

Thèse CIFRE ANRT.

Dossier de candidature

- CV
- Lettre de motivation
- Relevés de notes des trois dernières années et classement dans la promotion
- Deux lettres de recommandation

Contacts

- bourinet@sigma-clermont.fr
- julien.ah-pine@sigma-clermont.fr
- cecile.mattrand@sigma-clermont.fr
- gomond@phimeca.com



Development of a robust inverse optimization methodology for the design of new steel grades

Context and overall objective of the project

The development processes for new materials such as metal alloys are often very long, and do not necessarily guarantee either a good exploration of the design field, or the achievement of materials with maximized performances (even though they meet the initial specifications). In order to remain competitive in a volatile, complex and uncertain societal context, French industries therefore need to enhance their current methodologies to shorten development times, from materials design to market launch, and thus adopt a frugal approach to reduce the waste associated with over-consumption of materials. The proposed PhD thesis falls within this context, with the overall aim of **developing methods and tools for the virtual design of materials**. It will be carried out in partnership with Aubert & Duval, a company specializing in high-performance metallurgical products for a number of strategic sectors such as aeronautics, defense and energy.

Scientific and technological challenges and objectives

The thesis will focus on the development process for a steel grade, which is based on three stages:

- **the development** of raw products, called ingots, based on a target chemical composition, i.e. the list of chemical elements required to produce the material,
- **the transformation** of ingots into semi-finished products (bars, billets), then potentially into finished products (closed-die forging, stamping, etc.),
- **the heat treatment**, which completes the series of microstructural changes required to obtain target properties such as mechanical and thermal resistance, toughness and resistance to corrosion and oxidation.

At the end of these material transformation stages, various measurements are carried out on the products, on the one hand at the microstructural scale (grain size and distribution, phase percentages, characterization of inclusion cleanliness, segregations, etc.), and on the other hand at the macroscopic scale, which is that of usage properties.

This material development process is highly complex overall, requiring several iterations before converging on the customer's specifications.

The properties of use observed on finished products are naturally closely linked to the chemical composition of the alloy, but also to the parameters of the transformation processes and heat treatments implemented during production on an industrial scale. Although it is

conceivable that a global optimum solution for the triptic - **chemical composition, process parameters and heat treatments** - might theoretically exist, finding it is extremely difficult, if not impossible in practice due to the associated costs. This is partly due to the topology and range of the design domain to be explored, and to the complexity of the phenomena involved. This difficulty is compounded by the many variabilities involved. For example, there are discrepancies between the target chemical composition of the grade and those obtained on the products. There are also uncertainties concerning the parameters of the processes used, and dispersions are measured on the final properties of use. **Understanding the intrinsic links between the various stages, their dependences and the transport of uncertainties, is therefore a major challenge in tackling the problem.**

Overcoming this barrier is a long-term global objective for all materials designers. This work falls within this framework, focusing here on **the implementation of a methodology for the design of steel grades based on the measurement of properties at the microstructural level (intermediate scale) and properties of use**. The aim is therefore to learn the inverse relationship between properties and process parameters (see figure 1), and thus to place ourselves in a reverse engineering context.

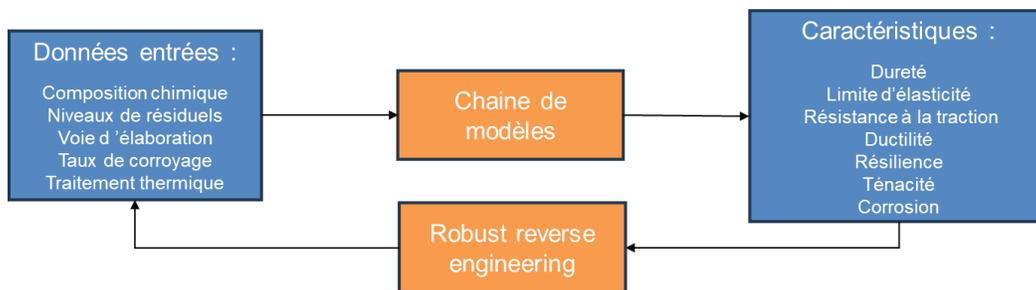


Figure 1. Reverse engineering approach to material design.

For this purpose, phenomenological models with several levels of fidelity and knowledge-based rules will be used, in conjunction with available data (chemical compositions, measurements of certain intermediate properties, measurements of certain properties of use), from the same family of steels. The parameters of the manufacturing, transformation and heat treatment processes will be considered as contextual elements, and will not form part of the design/optimization variables.

An original research work is needed to combine physical and data-driven approaches (in the context of statistical learning in artificial intelligence) to **solve the multi-objective, multi-criteria inverse optimization problem, with uncertainties in its inputs and outputs**.

Such a robust optimization problem requires several technological and methodological hurdles to be overcome. The first methodological hurdle concerns the hybrid formulation of the proposed approach, combining physical models and machine learning models to take advantage of both sources of information. A second technological hurdle concerns the implementation of a forward and backward simulation chain of different types of multi-scale,

nested and multi-fidelity models (see figure 2), linking chemical composition and usage properties.

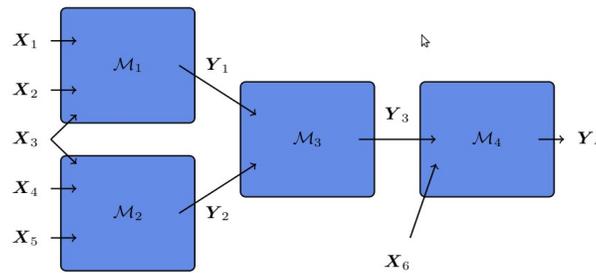


Figure 2. Example of a chain of nested models. There may be physical models, with different levels of fidelity, and statistical learning models.

A third methodological obstacle is directly linked to the inverse optimization problem to be solved, given the high dimensionality of the inputs and outputs and their nature (discrete, continuous, etc.), the number of objective functions and criteria, and the uncertainties to be modeled.

Description and organization of work

The aim of this thesis is to develop a digital virtual testing tool which, based on desired characteristics and under certain constraints, can identify the most promising chemical compositions, in order to design new grades more efficiently.

Several tasks have already been identified:

- Literature review of existing methodologies for the development of steel grades and other materials.
- Analysis of databases supplied by Aubert & Duval to extract relevant characteristics and prepare learning models.
- Construction of the numerical model chain and evaluation of its performances. This chain of models will be made up of simulation models and knowledge-based rules supplied by Aubert & Duval (physical models), as well as machine learning models. It should be able to predict properties at different scales (microstructure / usage properties).
- Implementation of the inverse optimization problem and development of specific solution algorithms.

Background and skills expected

- Engineering or Master's degree with a solid grounding in statistics and machine learning. Skills in materials science and test data analysis would be a plus;
- Appetence for applied research and numerical modeling;
- Computer programming skills;
- Rigor, autonomy and ability to work in a team.

Location and supervision

The thesis will be carried out at Phimeca Engineering's Cournon-d'Auvergne site. The PhD student will be enrolled at LIMOS (CNRS UMR 6158 research laboratory) in Clermont Ferrand. The application of the methodologies developed will be based mainly on data supplied by Aubert & Duval.

The work will be supervised by Jean-Marc Bourinet (LIMOS, thesis co-supervisor), Julien Ah-Pine (LIMOS, thesis co-supervisor), Cécile Mattrand (Institut Pascal, co-supervisor) and Antoine Gomond (Phimeca Engineering, co-supervisor).

Funding

ANRT CIFRE PhD thesis.

Application documents

- Resume
- Cover letter
- Transcripts for the last three years and class ranking
- Two letters of recommendation

Contacts

- bourinet@sigma-clermont.fr
- julien.ah-pine@sigma-clermont.fr
- cecile.mattrand@sigma-clermont.fr
- gomond@phimeca.com