

Simulation métallurgique et optimisation des traitements thermiques : une approche multi-physique et multi-échelle

Autrefois, l'optimisation des traitements thermiques des matériaux métalliques reposait sur des essais empiriques, longs et coûteux. Aujourd'hui, la simulation numérique permet de modéliser et d'analyser des processus multi-physique et multi-échelle en s'appuyant sur des données issues de sources analytiques, empiriques et numériques.

Richard Tomasi,
responsable technique
assemblage multi-
matériaux, Cetim

La simulation numérique offre une compréhension approfondie des phénomènes, anticipe les défauts et optimise les procédés, contribuant ainsi à réduire les coûts et à améliorer la qualité des pièces industrielles, en particulier dans des secteurs stratégiques tels que la défense, la mobilité et l'énergie.

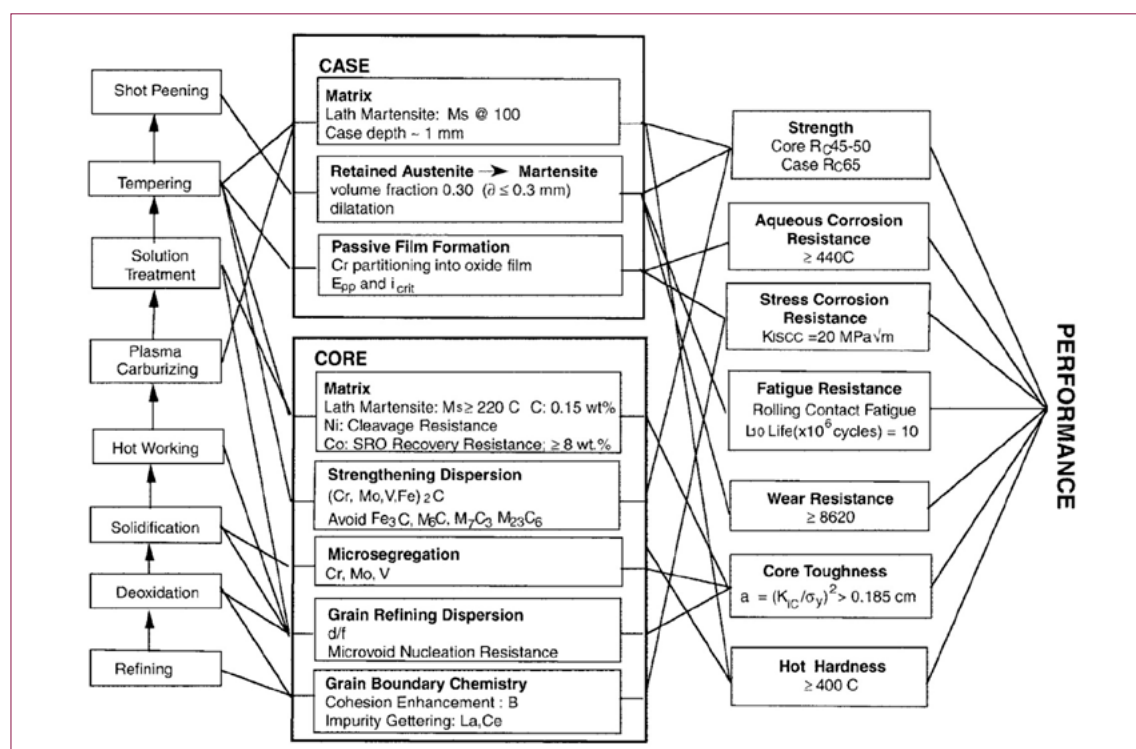
Ainsi, les stratégies ICME (Integrated Computational Materials Engineering) permettent de relier les procédés, la microstructure, les propriétés et les performances des matériaux, facilitant ainsi l'optimisation multi-objectifs. Comme présenté sur la **figure 1**, il est souvent indispensable que les matériaux satisfassent simultanément des propriétés de résistance mécanique, de tenue au choc, à l'usure et à la corrosion.

Répondre à ces exigences nécessite de connecter étroitement les paramètres d'élaboration, de traitement thermique et de surface avec les descripteurs

microstructuraux, à la fois à cœur et en surface de la pièce en question. Cette démarche ouvre la voie à une ingénierie inverse (Backward Prediction) permettant de remonter des performances attendues vers des gammes procédés/microstructures optimales, mais aussi à des prédictions directes (Forward Prediction) fiables pour quantifier l'impact des aléas des procédés d'élaboration sur la microstructure les propriétés des aciers.

Par des couplages avancés entre modèles multi-échelles, bases de données expérimentales et algorithmes d'apprentissage, il devient possible d'établir des fenêtres opératoires robustes, indispensables pour guider les choix matériaux-processus et sécuriser l'industrialisation. Cette capacité à piloter les compromis et incertitudes dès la phase de conception représente un levier clé pour l'industrie afin d'accélérer l'innovation tout en maîtrisant les risques techniques et économiques.

Figure 1.
Diagramme de flux illustrant les interactions entre le procédé, la structure, les propriétés et les performances pour un acier inoxydable martensitique à durcissement secondaire et cémentation.^[1]



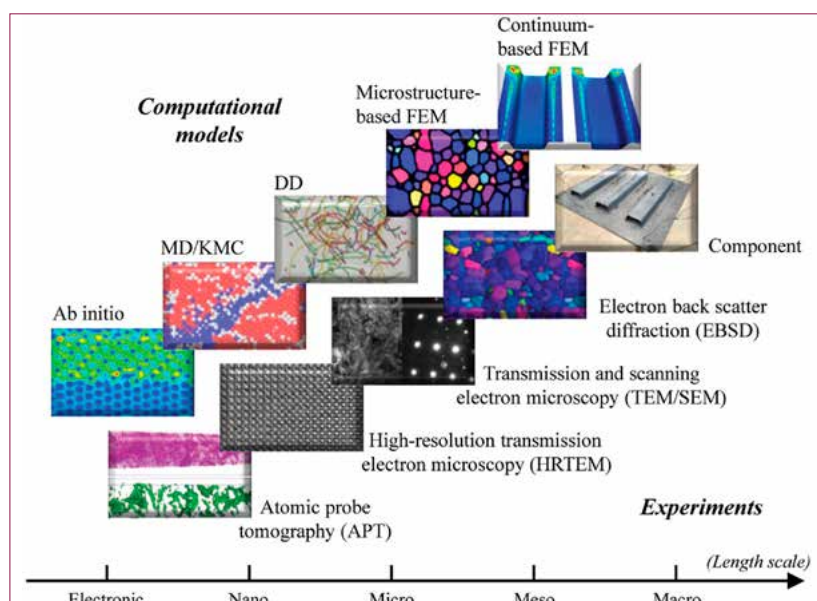
L'approche ICME constitue également un levier pour l'optimisation des procédés de traitement thermique et thermochimique, en particulier lorsqu'il s'agit de concevoir des gradients fonctionnels optimaux de propriétés en surface et à cœur. En exploitant des modèles couplés de diffusion, de transformations de phases et de précipitation, l'ICME permet de prédire l'évolution de la microstructure induite par le traitement, et d'en déduire les profils de dureté, de ténacité, de résistance à l'usure et à la corrosion. Cette capacité prédictive est essentielle pour définir les profondeurs de traitement optimales, adaptées aux sollicitations mécaniques réelles en service, tout en maîtrisant les risques de défaillance prématurée.

LES PILIERS DE L'AIDE AU CHOIX DES MATÉRIAUX ET L'OPTIMISATION DES PROCÉDÉS

Comme présenté sur la **figure 2**, l'optimisation des matériaux et des procédés se fait à travers une stratégie de modélisation multi-échelle basée sur la correspondance hiérarchique entre la simulation numérique et la validation expérimentale :

1. La simulation numérique

Permettant d'explorer le comportement des matériaux à différentes échelles, cette approche nourrit des modèles allant du niveau atomique à celui de la pièce



industrielle. Ainsi, dans le contexte d'aide au choix des matériaux métalliques, il est important de définir un plan d'expérience numérique afin d'explorer de manière systématique différentes conditions de traitement thermique (température, durée, refroidissement). Ces simulations permettent d'explorer rapidement un large espace de paramètres, d'identifier les conditions optimales pour obtenir la microstructure souhaitée

Figure 2. Paradigme hiérarchique des modèles computationnels et des expériences pour une stratégie de modélisation multi-échelle.^[2]

(martensite, bainite, ferrite), tout en anticipant les contraintes résiduelles et déformations. Cette approche repose souvent sur des méthodes statistiques de type DoE (Design of Experiments) pour maximiser l'information obtenue tout en limitant le nombre de cas à simuler.

2. La validation expérimentale

Les essais expérimentaux permettent de valider et d'ajuster les modèles numériques. La validation expérimentale peut se faire d'abord à l'échelle matériau par des essais de dilatométrie reproduisant les cycles simulés afin de confirmer la cinétique de transformation. Ensuite, les paramètres sélectionnés sont appliqués à des prototypes pour vérifier la réponse réelle du matériau (dureté, microstructure, contraintes). Une analyse détaillée de la microstructure complète cette démarche en offrant une compréhension fine des mécanismes de durcissement ou de fragilisation des matériaux métalliques. Les écarts éventuels entre simulation et expérience permettent d'ajuster les modèles, assurant ainsi la robustesse du traitement thermique final.

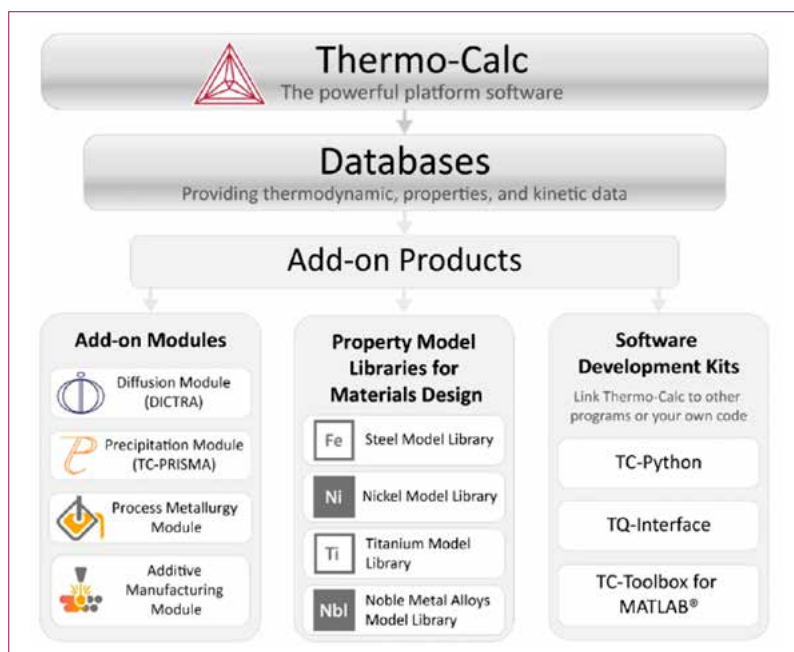
1 LA SIMULATION NUMÉRIQUE À DIFFÉRENTES ÉCHELLES

À l'échelle de la microstructure

Les avancées récentes en simulation numérique ont profondément transformé la conception des aciers et l'optimisation des traitements thermiques. De la modélisation atomistique à la simulation thermodynamique via la méthode CALPHAD, ces outils permettent d'étudier les phénomènes inhérents aux transformations métallurgiques. La modélisation atomistique, telle que la dynamique moléculaire (MD), permet d'étudier les interactions entre atomes et les mécanismes fondamentaux à l'échelle nanométrique. Ces simulations sont particulièrement utiles pour comprendre les phénomènes tels que la diffusion atomique, la formation de dislocations ou la croissance de précipités.

Figure 3.

La suite logicielle Thermo-Calc, avec une multiple gamme de produits et de bases de données pour chaque module complémentaire, pour la simulation de la diffusion, la précipitation, la métallurgie des procédés.^[3]



Ces méthodes sont complémentaires et peuvent être couplées pour étudier des phénomènes multi-échelles dans les matériaux. Cependant, en raison de leur coût computationnel élevé, elles sont limitées à des échelles de temps et d'espace restreintes, ce qui rend leur application directe à l'échelle industrielle difficile. Ces simulations restent toutefois utiles pour informer les bases de données thermodynamiques, notamment celles utilisées dans le cadre des méthodes de type CALPHAD (CALculation of PHase Diagrams). Il s'agit d'une approche thermodynamique permettant de prédire les équilibres de phases dans les alliages métalliques. Elle repose sur l'optimisation de modèles thermodynamiques à partir de données expérimentales et de résultats de simulation atomistique pour calculer des diagrammes de phases et des propriétés thermodynamiques (figure 3).

Thermo-Calc est un des logiciels de calcul thermodynamique basé sur la méthode CALPHAD, permettant de prédire les équilibres de phases dans les alliages métalliques. Il est souvent utilisé en combinaison avec ses modules complémentaires :

- **DICTRA (Diffusion Controlled TRAnsformations)** : module dédié à la simulation des transformations contrôlées par diffusion dans les systèmes multi composants. Il résout numériquement les équations de diffusion en utilisant les bases de données thermodynamiques et de mobilité associées à Thermo-Calc.^[4]
- **TC-PRISMA (Precipitation Simulation Module)** : outil de simulation de la précipitation dans les matériaux, basé sur la théorie de la nucléation et de la croissance. Il utilise les mêmes bases de données que Thermo-Calc et DICTRA, permettant une intégration cohérente des données thermodynamiques et cinétiques.

Thermo-Calc, via DICTRA et TC-PRISMA, offre respectivement la résolution des équations de diffusion multi composant par différences finies implicites et la modélisation de type Langer-Schwartz-Kampmann-Wagner^[5] des processus de germination et de croissance de phases métalliques. Ces outils sont particulièrement utiles pour la conception d'alliages et l'optimisation des traitements thermiques, en fournissant des informations détaillées sur les transformations de phases et la formation de précipités.

D'autres logiciels, tels que JMatPro, MatCalc, FactSage, partagent la méthode de minimisation de l'énergie libre de Gibbs pour déterminer les équilibres de phases, mais diffèrent par leurs modules et algorithmes de cinétique :

- JMatPro étend un modèle de Kirkaldy aux aciers et calcule les diagrammes TTT et TRC à partir de la composition, de la taille des grains et de la température de maintien.^[6] Pour la cinétique, il met en œuvre le modèle de N. Saunders étendu aux aciers : la nucléation suit la théorie classique, la croissance est limitée par la diffusion atomique, et les équations de transport sont intégrées dans le temps pour prédire les temps de début et de fin de transformation (Ferrite, Perlite, Bainite).
- MatCalc réalise d'abord l'équilibre par minimisation CALPHAD de l'énergie libre de Gibbs sur un réseau de compositions et de températures, puis simule la cinétique de précipitation via le modèle comme

Kampmann–Wagner Numerical (KWN) : la distribution de taille des précipités évolue selon des équations différentielles de nucléation–croissance–coalescence, résolues numériquement en s'appuyant sur des mobilités CALPHAD pour les flux diffusifs.

- Le module Equilib de FactSage est le moteur de minimisation de l'énergie libre de Gibbs qui calcule les fractions de phase à l'équilibre sous conditions données (Température, Pression, Composition) via un algorithme de multiplicateurs de Lagrange.

À l'échelle du composant

La simulation des traitements thermiques par éléments finis permet d'établir des liens entre les conditions de traitement thermique, l'évolution microstructurale et le comportement mécanique macroscopique, afin de prévoir les caractéristiques mécaniques des pièces. Les logiciels commerciaux sont capables de coupler de façon étroite la conduction thermique, les transformations métallurgiques et la mécanique des matériaux pour prédire la dureté, les déformations et les contraintes résiduelles. Ces outils répartissent les phénomènes physiques en modules interconnectés : transfert de chaleur (conduction, convection, rayonnement), évolution des phases (diffusive et displacive) et comportement mécanique (élasticité, plasticité et dilatation thermique). Ces logiciels utilisent des schémas de résolution numérique, comme l'approche implicites de Newton–Raphson,

pour résoudre les équations couplées. Le choix et la qualité des données matériaux sont cruciaux, car toute erreur se traduira par des écarts significatifs entre simulation et réalité^[7]. La fiabilité des simulations dépend de la qualité des données : courbes TTT/TRC réelles, propriétés mécaniques en fonction de la température et de la phase, et propriétés thermo physiques. Des bases de données (Thermo-Calc, JMatPro, CES EduPack) ou des mesures expérimentales permettent de calibrer ces paramètres pour chaque nuance.

Parmi les logiciels de calcul par éléments finis souvent utilisés pour les traitements thermiques, nous retrouvons :

- Abaqus^[8] : un logiciel de simulation par éléments finis développé par Dassault Systèmes. Grâce au développement de sous-routines (ex. UMAT, UMATHT), la prédiction des transformations de phase et des contraintes internes sur l'historique thermique est possible. La résolution couplée thermique–métallurgique–mécanique intègre la chaleur latente de transformation ainsi que l'impact de la plasticité dans la cinétique de transformation des phases. Il permet donc d'évaluer simultanément l'évolution des champs de température et de contrainte/déformation lors du traitement thermique.
- COMSOL Multiphysics est un logiciel de simulation par éléments finis qui permet de modéliser et de simuler des phénomènes physiques complexes. La prédiction

des transformations de phase grâce au module « Metal Processing ». Il propose plusieurs modèles spécifiques pour le traitement thermique des aciers, notamment la décomposition de l'austénite lors de la trempe. COMSOL Multiphysics permet des couplages forts avec d'autres modules, tels que l'Electromagnetics Module (EM) et le Computational Fluid Dynamics Module (CFD).

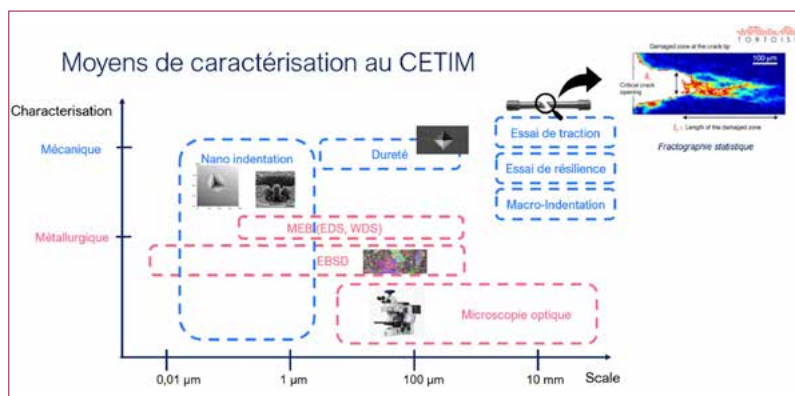
- DEFORM-HT (Scientific Forming Technologies) est un logiciel dédié à la simulation des traitements thermiques, prédisant la microstructure, la distorsion et les contraintes résiduelles.
- FORGE et SIMHEAT sont deux logiciels de simulation développés par Transvalor, spécialisés dans la modélisation des procédés de mise en forme des matériaux et des traitements thermiques. Ils permettent d'analyser l'impact des cycles thermiques complets (trempe, revenu, nitruration).

Enfin, dans le cas de la trempe, le coefficient de convection sur la surface du composant varie fortement avec le fluide de trempe : l'eau génère des films de vapeur instables, l'huile présente des gradients plus doux, les polymères offrent un contrôle précis. Ainsi, il est souvent nécessaire de modéliser le coefficient d'échange via un couplage avec un code CFD (Computational Fluid Dynamics) pour obtenir des prédictions fiables des gradients thermiques et des contraintes induites^[9]. Les méthodes inverses (comparaison des courbes de refroidissement) fournissent des lois de convection, mais un couplage direct entre les modèles thermique et fluide (ex. ANSYS Fluent, StarCCM+, COMSOL) modélise l'écoulement, la turbulence et la formation du film, améliorant la prédiction des gradients thermiques et des contraintes.

2. LA VALIDATION EXPÉRIMENTALE

La dilatométrie est une des techniques incontournables pour valider les données d'entrée des modèles de simulation de traitement thermique. Elle permet de remonter, à travers la dilatation thermique, aux températures critiques de transformation de phases. Elle est également utilisée pour simuler physiquement les conditions de traitement. La dilatométrie, accompagnée par la caractérisation métallurgique et mécanique (cf. **figure 4**), fait partie de la démarche intégrale proposée par le CETIM (Centre Technique des Industries Mécaniques) pour garantir une validation rigoureuse des outils numériques et permet d'optimiser avec confiance la sélection des aciers et leurs traitements thermiques.

Figure 4.
Moyens multi-échelles de caractérisation mécanique et métallurgique, proposés par le CETIM.



CARACTÉRISATION MICROSTRUCTURALE ET MÉCANIQUE

Une compréhension fine des mécanismes de déformation et de rupture est obtenue grâce à diverses techniques :

• Microscopie :

Les techniques de microscopie sont essentielles pour l'analyse quantitative de la microstructure des aciers, permettant de valider les modèles de simulation de traitements thermiques. La microscopie optique (OM) est souvent la première étape, offrant une vue d'ensemble de la microstructure, y compris la taille des grains, la distribution des phases et la présence de défauts. La microscopie électronique à balayage (MEB), couplée à la diffraction des électrons rétrodiffusés (EBSD), permet d'obtenir des images à haute résolution et de cartographier les orientations cristallographiques et les distributions de phases. Cette technique est cruciale pour analyser la nature et la distribution des joints de grains. La microscopie électronique en transmission (MET) offre des images à résolution encore plus élevée, révélant la structure cristallographique des phases et des précipités nanométriques et des dislocations, ce qui est indispensable pour évaluer les mécanismes de durcissement structural des aciers.

La microscopie électronique en transmission à balayage (STEM) combine les avantages du TEM et du SEM, permettant une analyse détaillée de la micro-ségrégation à l'échelle nanométrique avec une résolution élevée. Le STEM est utilisé pour étudier les interfaces et les précipités dans les matériaux traités thermiquement. La diffraction des électrons rétrodiffusés en transmission (TKD), une technique dérivée de l'EBSD utilisée en mode transmission dans le MEB, permet une analyse cristallographique à haute résolution des matériaux fins, offrant des informations détaillées sur la texture et les orientations des grains. Enfin, la tomographie par sonde atomique (ATP) permet une reconstruction tridimensionnelle de la composition atomique des matériaux, analysant la distribution des éléments d'alliage et les précipités à l'échelle atomique. Ces techniques de microscopie permettent une analyse approfondie de la microstructure des aciers, facilitant l'optimisation des processus de traitement thermique pour atteindre les propriétés mécaniques et les performances souhaitées.

• Techniques complémentaires :

D'autres techniques sont également utiles pour analyser de manière quantitative la microstructure des aciers, permettant d'optimiser les traitements thermiques. La diffraction des rayons X (DRX) permet d'identifier et de quantifier les phases cristallines telles que l'austénite résiduelle, la martensite et les carbures. Elle évalue également les contraintes résiduelles en analysant les décalages de pics de diffraction. La calorimétrie à balayage différentiel (DSC) mesure les flux de chaleur lors des transitions de phase, fournissant des informations sur les températures critiques et les effets thermiques.

des transformations. Ces données sont essentielles pour valider les diagrammes de phases simulées. Le pouvoir thermoélectrique (PTE), une technique non destructive, est sensible aux défauts de la microstructure comme les impuretés, les précipités et les dislocations. La mesure du PTE peut permettre un suivi in-situ de l'évolution de l'état microstructural au cours du traitement thermique.

Des techniques de pointe, comme le synchrotron et la diffraction de neutrons, sont particulièrement efficaces pour détecter des phénomènes fins in situ. Elles offrent une analyse approfondie des microstructures et des transformations de phase dans les matériaux. Ces techniques avancées sont essentielles pour optimiser les propriétés des aciers. Ces techniques permettent d'établir de données quantitatives nécessaires pour ajuster les propriétés thermodynamiques et cinétiques des aciers. Les informations obtenues sont intégrées dans des bases de données comme CALPHAD et utilisées dans des modèles de simulation. Cela permet de valider les prédictions de microstructures des matériaux sous différents traitements thermiques, assurant ainsi une meilleure performance et durabilité des aciers. En combinant ces techniques, les ingénieurs peuvent développer des gammes de traitement thermique des aciers avec des propriétés spécifiques adaptées aux exigences industrielles.

• Essais mécaniques :

La caractérisation mécanique est nécessaire dans la validation des modèles de simulation numérique. Les tests mécaniques standards, tels que la traction, la dureté, la résilience, fournissent des données empiriques essentielles. Ces données permettent d'ajuster les paramètres des modèles de simulation pour qu'ils reflètent fidèlement le comportement réel des matériaux. Par exemple, les essais de traction à différente température permettent de calibrer les modèles rhéologiques décrivant le comportement des matériaux sous les conditions de chargements thermomécaniques. La nano indentation, en revanche, offre une évaluation locale des propriétés mécaniques à l'échelle microscopique. Cette technique permet de mesurer des paramètres tels que la dureté et le module d'élasticité à des échelles très fines, souvent inaccessibles par les tests mécaniques standards. En combinant les résultats de la nano indentation avec ceux des tests mécaniques traditionnels, il est possible de développer des modèles de simulation plus complets et précis. Enfin, les tests de résilience et de fatigue, quant à eux, permettent de valider chaque gamme de traitement thermique en fonction des exigences spécifiés. Ainsi, en intégrant ces données dans les simulations, on peut améliorer la précision et la fiabilité des prédictions. Ces modèles peuvent alors être utilisés pour prédire le comportement des matériaux sous diverses conditions de charge et d'environnement, contribuant ainsi à la conception de structures plus sûres et plus performantes.

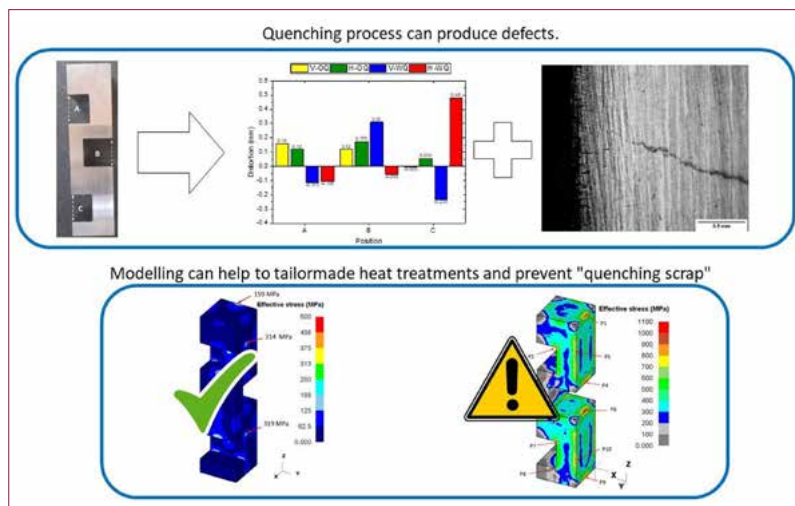


Figure 5.

Apport de la simulation numérique du traitement thermique pour prédire et contrôler les déformations et la fissuration dans les aciers trempés.^[10]

3. REVERSE ENGINEERING

La simulation numérique peut avoir une valeur ajoutée dans l'analyse de défaillance et la non-conformité des pièces après traitement thermique. En permettant la modélisation précise des processus thermiques et mécaniques, elle aide à prédire les comportements des matériaux sous différentes conditions. Ainsi, la simulation numérique peut être utilisée pour l'identification des facteurs d'influence ayant conduit à la localisation des contraintes élevées et l'amorçage de fissure.

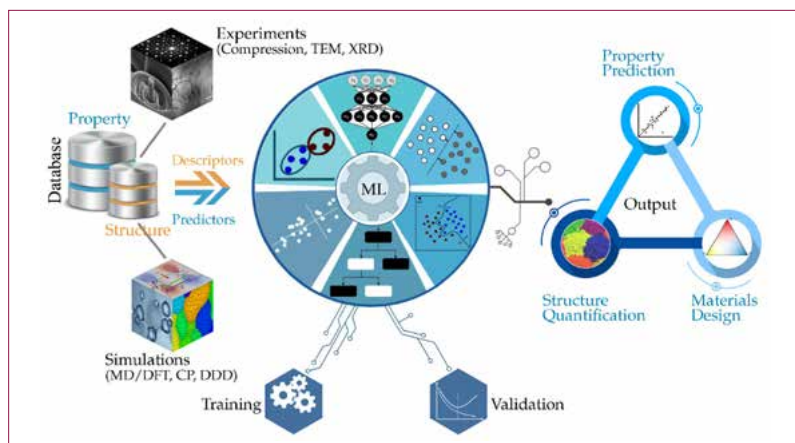
La **figure 5** présente une démarche paramétrique permettant d'évaluer la sensibilité à la fissuration lors de la trempe d'un acier. Grâce à la combinaison des résultats de la simulation et de l'expérimental, il est possible de mettre en évidence l'impact des contraintes résiduelles, générées à cause des gradients thermiques élevés et des transformations de phase (austénite-martensite), et des contraintes générées au niveau des zones géométriquement complexes. Ces résultats soulignent l'importance de la conception des traitements thermiques et de l'utilisation de modèles numériques pour prédire et contrôler les phénomènes de distorsion et de fissuration dans les aciers trempés.

Apport de l'intelligence artificielle

Comme illustré schématiquement dans la **figure 6**, la mise en œuvre d'une approche basée sur l'apprentissage

Figure 6.

Workflow typique pour l'apprentissage automatique, avec les bases de données générées par des données expérimentales et de simulation pour fournir des descripteurs et des prédictors pertinents.^[11]



automatique implique le traitement d'une quantité suffisante de données expérimentales et de simulation, afin d'établir les liens entre les paramètres d'élaboration, des descripteurs atomiques et/ou microstructuraux et des propriétés d'usage des matériaux.

Le recours à l'IA dans la conception des aciers et l'optimisation des procédés connaît une avancée significative grâce à des outils tels qu'AlloyGPT^[12]. Il est basé sur des modèles de langage de grande taille (LLM), comme GPT-4, combiné à des agents d'IA collaboratifs, visant à automatiser et accélérer le développement de matériaux et de procédés. En s'appuyant sur des données ICME (Integrated Computational Materials Engineering) et des bases de données thermodynamiques CALPHAD, AlloyGPT peut prédire les caractéristiques microstructurales et les propriétés des alliages d'aluminium, surpassant les techniques traditionnelles d'optimisation bayésienne et d'apprentissage automatique.

L'IA peut être également utilisée dans la prédiction des diagrammes de phase et peut révolutionner la conception des matériaux. Des approches telles que le prompt engineering, le fine-tuning et la génération augmentée par récupération (RAG) sont utilisées pour améliorer la précision des modèles de langage dans ce domaine.

Par exemple, le modèle PDGPT^[13], conçu pour les alliages de magnésium, combine ces techniques pour extraire efficacement des informations sur les diagrammes de phase à partir de données textuelles et numériques, surpassant les méthodes traditionnelles en termes de rapidité et de précision.

Des liens entre la composition chimique, l'énergie de défaut d'empilement dans les aciers inoxydables austénitiques et les courbes de trempabilité Jominy des aciers peuvent être établies grâce à l'apprentissage automatique. En ce qui concerne la prédiction de l'énergie de défaut d'empilement (SFE) en fonction de la composition chimique, une étude a combiné la modélisation thermodynamique et l'apprentissage automatique pour prédire la SFE de plus de 300 aciers austénitiques^[14]. Les résultats ont montré que la SFE peut être prédite avec précision en fonction de la composition chimique, ce qui est essentiel pour concevoir des aciers avec des propriétés mécaniques optimales.

Concernant la prédiction des courbes de trempabilité Jominy des aciers, une approche innovante a été développée pour prédire automatiquement et avec précision la composition chimique de l'acier en fonction de la courbe Jominy souhaitée^[15]. Cette méthode prend en compte la microstructure, notamment la présence de martensite à différentes distances de l'extrémité trempée de l'échantillon Jominy, permettant ainsi de concevoir des aciers répondant à des exigences spécifiques de trempabilité.

Dans le contexte des traitements thermiques, ces approches facilitent l'exploration rapide des espaces de composition et des fenêtres procédés, tout en intégrant de manière dynamique les retours de données d'essais, pour affiner en continu les prévisions de performance et de durabilité. Les principaux enjeux limitant l'usage de

l'apprentissage automatique dans la conception des matériaux sont l'accès continu à des données de haute qualité et la complexité de ces données, qui nécessitent des descripteurs précis pour capturer les mécanismes physiques pertinents. De plus, l'interopérabilité des données et la gestion du bruit et des incertitudes sont essentielles pour garantir des prédictions fiables et précises.

CONCLUSION

L'optimisation des matériaux et des procédés en métallurgie s'appuie sur une approche multi-échelle combinant simulation numérique, validation expérimentale et analyse microstructurale. L'usage conjoint de la forward prediction et du reverse engineering permet non seulement de prévoir les propriétés finales des matériaux, mais aussi de diagnostiquer et corriger les écarts de processus. Avec l'avènement de la métallurgie 4.0, l'intégration de l'intelligence artificielle et des jumeaux numériques ouvrent la voie à des procédés industriels plus précis, réactifs et adaptés aux défis actuels.

Dans un contexte industriel, l'approche hybride IA-physique permet de renforcer la fiabilité et l'agilité des décisions, en intégrant les aléas des procédés et les variabilités matériaux, tout en réduisant les temps et coûts d'expérimentation. Elle ouvre ainsi la voie au développement de nouvelle génération d'outils capables de simuler non seulement la réponse des matériaux à des scénarios de traitements thermiques complexes, mais également leurs comportements en service des matériaux, en tenant compte des gradients microstructuraux, des états de contraintes résiduelles, et des mécanismes de vieillissement.

Bien que les outils de simulation avancés offrent des avantages considérables, leur mise en œuvre industrielle n'est pas sans défis. En effet, ils nécessitent des compétences spécialisées, du temps et des moyens considérables pour être pleinement opérationnels. Le CETIM travaille activement sur ces sujets, notamment à travers les Projets Thématiques Transversaux (PTT) traitement thermique et contraintes résiduelles (METHERM). Ce dernier vise à développer des technologies et des méthodes pour optimiser les procédés thermiques en métallurgie, en intégrant la simulation numérique. Ces efforts sont essentiels pour rendre ces outils plus accessibles et utilisables dans un contexte industriel, permettant ainsi de mieux maîtriser les procédés de traitement thermique. ■

RÉFÉRENCES

1. Campbell, C., Olson, G. Systems design of high-performance stainless steels I. Conceptual and computational design. *Journal of Computer-Aided Materials Design* 7, 145–170 (2000). <https://doi.org/10.1023/A:1011808225838>
2. Park, Jinheung & Min, Kyung & Kim, Hyunki & Hong, Seung - Hyun & Lee, Myoung-Gyu. (2022). Integrated Computational Materials Engineering for Advanced Automotive Technology: With Focus on Life Cycle of Automotive Body Structure. *Advanced Materials Technologies*. 8. 10.1002/admt.202201057.
3. <https://thermocalc.com/products/>
4. Borgenstam, Annika & Höglund, Lars & Ågren, John & Engström, Anders. (2012). DICTRA, a tool for Simulation of Diffusional Transformations in Alloys. *Journal of Phase Equilibria*. 21. 269–280. 10.1361/105497100770340057.
5. Sheng, Z., Bonvalet Rolland, M., Zhou, T. *et al.* Langer–Schwartz–Kampmann–Wagner precipitation simulations: assessment of models and materials design application for Cu precipitation in PH stainless steels. *J Mater Sci* 56, 2650–2671 (2021). <https://doi.org/10.1007/s10853-020-05386-9>.
6. Saunders, Noa & Guo, Zhanli & Li, X. & Miodownik, A. & Schillé, J.-P. (2004). The Calculation of TTT and CCT diagrams for General Steels.
7. Turner, Richard & Schroeder, Florian & Ward, R.M. & Brooks, J.W. (2014). The Importance of Materials Data and Modelling Parameters in an FE Simulation of Linear Friction Welding. *Advances in Materials Science and Engineering*. 2014. 10.1155/2014/521937.
8. Yaakoubi, Mahmoud & Kchaou, M. & Fakhreddine, Dammak. (2013). Simulation of the thermomechanical and metallurgical behavior of steels by using ABAQUS software. *Computational Materials Science*. 68. 297–306. 10.1016/j.commatsci.2012.10.001.
9. Bouissa, Yassine & Shahriari, Davood & Champlaud, Henri & Jahazi, Mohammad. (2018). Prediction of Heat Transfer Coefficient during Quenching of Large Size Forged Blocks using Modeling and Experimental Validation. *Case Studies in Thermal Engineering*. 100379. 10.1016/j.csite.2018.100379.
10. Lopez-Garcia, R. D., Medina-Juárez, I., & Maldonado-Reyes, A. (2022). Effect of Quenching Parameters on Distortion Phenomena in AISI 4340 Steel. *Metals*, 12(5), 759. <https://doi.org/10.3390/met12050759>
11. Frydrych, K., Karimi, K., Pecelerowicz, M., Alvarez, R., Dominguez-Gutiérrez, F. J., Rovaris, F., & Papanikolaou, S. (2021). Materials Informatics for Mechanical Deformation: A Review of Applications and Challenges. *Materials*, 14(19), 5764. <https://doi.org/10.3390/ma14195764>
12. A. Ghafarollahi, M.J. Buehler. (2024), Rapid and Automated Alloy Design with Graph Neural Network-Powered LLM-Driven Multi-Agent Systems, *arXiv*, DOI:000000/11111, 2024
13. Yan, Zini & Liang, Hongyu & Wang, Jingya & Zhang, Hongbin & Kwiatkowski da Silva, Alisson & Liang, Shiyu & Rao, Ziyuan & Zeng, Xiaojin. (2024). PDGPT: A large language model for acquiring phase diagram information in magnesium alloys. *Materials Genome Engineering Advances*. 2. 10.1002/mgea.77.
14. Wang, X., & Xiong, W. (2020). Stacking fault energy prediction for austenitic steels: thermodynamic modeling vs. machine learning. *Science and Technology of Advanced Materials*, 21(1), 626–634. <https://doi.org/10.1080/14686996.2020.1808433>
15. Tomašić, Neven & Sitek, Wojciech & Iljkić, Dario & Gemechu, Wendimu. (2024). Designing the Chemical Composition of Steel with Required Hardenability Using Computational Methods. *Metals*. 14. 10.3390/met14091076.