

Intelligence artificielle et conception d'alliages : exemples et perspectives

Marjorie Cavarroc, ingénieur R&T TTS voie sèche, experte senior, Safran Tech

Depuis son initiation vers le troisième millénaire avant notre ère, la conception d'alliages est une activité dont la complexité va croissante avec le nombre et la diversité des fonctions des alliages qu'elle produit. Essentiels « à la réalisation des objectifs communs de notre monde en développement » [ASO1], bronzes, fontes, aciers au carbone, aciers inoxydables, superalliages à base de nickel et alliages à base d'aluminium, de titane, de cobalt sont autant d'expressions des besoins de la société pour des matériaux devenus indispensables à l'essor d'abord des secteurs monétaires, agricoles, militaires et artistiques, puis des activités industrielles.

La conception d'alliages est un exercice intrinsèquement multi objectifs : les cahiers des charges applicatifs contiennent généralement maintes contraintes sur les caractéristiques au sens large des alliages qu'elles représentent des propriétés mécaniques (e.g., fatigue, fluage), environnementales (corrosion, oxydation) ou fonctionnelles (électriques, thermiques, magnétiques) ou des critères de mise en œuvre (coût, compatibilité avec d'autres matériaux). Respecter l'ensemble de ces contraintes est presque toujours inatteignable puisque nombre d'entre elles sont contradictoires. Il n'y a donc pas d'alliage à tout faire : le mot clé est « compromis » [ASO1].

La conception d'alliages est aussi un processus à maints paramètres. Le terrain de jeu étant le tableau de Mendeleïev, les premiers sont les éléments d'alliage ; les seconds sont les paramètres de mise en œuvre : par fonderie, forge, fabrication directe, etc. La combinaison de la nature et de la teneur des éléments d'addition, et du type et des paramètres de mise en œuvre, résultant en une microstructure, est un encodage préfigurant des propriétés finales d'un alliage. L'expression d'un tel encodage, simple en apparence, cache pourtant une explosion combinatoire : par exemple, le nombre de possibilités offertes pour la conception d'alliages à forte entropie (premiers paramètres)

mis en œuvre par dépôt en phase vapeur (seconds paramètres) dépasse 10^{100} , face à un âge de l'Univers de seulement quelques 10^{32} fs !

La conception d'alliages de complexité croissante au cours du précédent siècle a encouragé des développements théoriques visant à expliquer leur durabilité. Entre autres phénomènes théorisés peuvent être cités la plasticité, les phénomènes diffusionnels, les transformations de phases ou la genèse et l'évolution des microstructures et de leurs défauts. Dans leur domaine de validité, les modèles théoriques informent le concepteur quant aux choix à opérer concernant les deux jeux de paramètres. Ces paramètres étant nombreux, ce choix est traditionnellement adossé à une démarche expérimentale de validation ; la plus courante est la méthode dite par essais et erreurs qui consiste à explorer systématiquement un espace de paramètres (e.g., un panel de compositions et de microstructures) dans lequel la solution est supposée exister d'après les modèles.

L'histoire du XX^e siècle montre que l'exploitation de modèles théoriques et de la méthode par essais et erreurs, couplée à l'expérience de l'homme de l'art, a été couronnée de succès à de nombreuses occasions : l'alliage Ti-6Al-4V, inventé en 1951 par S. Abkowitz, et le superalliage Inconel 718 breveté en 1962 par H. Eiselstein en sont deux bons exemples. Cette métho-

dologie présente cependant plusieurs désavantages. L'exploitation de modèles théoriques est limitée par leur portée : la diversité des mécanismes influençant les propriétés d'usage d'un alliage est telle qu'aucune « théorie du tout » n'en offre aujourd'hui une description explicite ou une formalisation mathématique complète sur une gamme suffisamment large de paramètres. Autrement dit, la prédiction fiable d'une propriété d'usage à partir d'un modèle purement théorique dans tout l'espace des possibles est encore hors de portée. La méthode par essais et erreurs, quant à elle, tend à être coûteuse en temps comme en moyens puisqu'elle nécessite la caractérisation expérimentale d'autant d'alliages et de conditions de mise en œuvre que nécessaires pour arriver à une réponse satisfaisant le cahier des charges.

La recherche d'alternatives à un tel système apparaît d'autant plus pertinente que les alliages, au même titre que les autres matériaux, ont « de tout temps défini le niveau de notre civilisation technique » [ASO1]. Les avantages offerts par une réduction des coûts et des temps de développement d'alliages sont importants, et comprennent la production et la capitalisation accélérées de connaissances, ainsi que la différenciation concurrentielle par l'augmentation des performances des produits industriels.

L'intelligence artificielle (IA) est le « champ interdisciplinaire théorique et pratique qui a pour objet la compréhension de mécanismes de la cognition et de la réflexion, et leur imitation par un dispositif matériel et logiciel, à des fins d'assistance ou de substitution à des activités humaines » [JO18]. Il s'agit d'un ensemble de concepts et de méthodologies relevant notamment des domaines de la biologie, de la psycho-

logie, des mathématiques, de la physique et de l'ingénierie. Appliquée à la conception d'alliages, l'IA est surtout une collection d'outils éprouvés en statistiques dont l'usage représente une pratique relativement nouvelle, datant de la fin des années 1990. L'avantage est le contournement des limitations précédemment explicitées en vue d'accélérer la recherche des meilleurs compromis en assistant le concepteur et non en le remplaçant : « Quel qu'en soit le périmètre, l'IA reste un moyen et non une finalité en soit : elle n'est pas un substituant à l'homme, quand bien même elle effectuerait certaines tâches pour lui. » [RA18].

Parmi les applications de l'IA en conception d'alliages se trouvent ainsi :

- la modélisation par IA au travers de techniques d'apprentissage statistique (ou machine learning), soit une approche purement empirique car fondée sur des données préexistantes, consistant en une recherche de corrélations et en leur exploitation pour la prédiction de données futures;
- la modélisation physique aidée par l'IA, représentant un couplage des théories du domaine de la métallurgie et de l'apprentissage statistique pour en dépasser quelques limites;
- l'optimisation de la recherche de solutions ou, autrement dit, l'accélération de l'exploration du titanique espace des possibles en exploitant les deux précédents paradigmes, en remplacement de la méthode par essais et erreurs;
- la validation expérimentale, aidée par l'IA, constituant une évolution des moyens et des techniques expérimentales, nécessaire en cela qu'une accélération de la recherche d'alliages prometteurs n'est possible qu'en réduisant les temps de validation des prédictions issues des modèles; sont notamment entendus ici des aspects d'automatisation d'expériences (robotisation) et des post-traitements associés.

Toute réflexion autour de la conception d'alliages, qu'elle soit aidée par l'IA ou pas, et plus encore dans le cas où elle l'est, doit s'intéresser à la place capitale des données. Celles-ci concourent à la réussite des méthodes a. et b., de sorte que leur acquisition, leur gestion, leur conservation et leur partage soient des aspects fondamentaux, qu'elles soient préexistantes dans la littérature ou acquises par l'expérience (méthodes d.). La popularité grandissante des méthodes d'apprentis-

sage statistique, et en particulier de l'apprentissage profond (*deep learning*) depuis le début des années 2010, soutenue par l'émergence de moyens informatiques de plus en plus performants, a également touché le domaine de la métallurgie. La littérature scientifique regorge désormais d'exemples dont quelques-uns, assez représentatifs, sont présentés par la suite. De nombreuses propriétés ont fait l'objet d'une modélisation fondée sur des données expérimentales. Les travaux de Badmos et Bhadeshia rapportent la modélisation des propriétés mécaniques d'aciers renforcés par précipitation d'oxydes [BA98] ; leurs évolutions en fonction de la température sont bien reproduites par un réseau de neurones artificiels pour deux états métallurgiques (Figure 1). De la même manière, Tancret et al. [TA03] ont démontré la pertinence d'une régression par processus gaussiens (régression non-linéaire et non-paramétrique) pour la prédiction de la contrainte

de rupture en fluage de superalliages base nickel forgés (Figure 2).

Les techniques d'apprentissage statistique sont également employées dans le cas où les données proviennent de simulations et non pas d'expérience. Par exemple, Linto et Aidhy proposent une extrapolation des résultats de calculs ab initio (calculs fondés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité, DFT) sur des systèmes métalliques binaires à des systèmes d'ordre supérieur (Figure 3). La précision des extrapolations est proche de celle des calculs DFT réalisés à un coût bien supérieur, dans des systèmes ternaires, quaternaires et quinaires [L123]. Une telle approche est généralisable à d'autres caractéristiques, par exemple les diagrammes de phases [DE22]. (Cf. figure 3, page suivante)

L'augmentation des données, une pratique consistant à générer des données synthétiques à partir de données expérimentales, a également été employée, permettant, entre autres, une amélioration

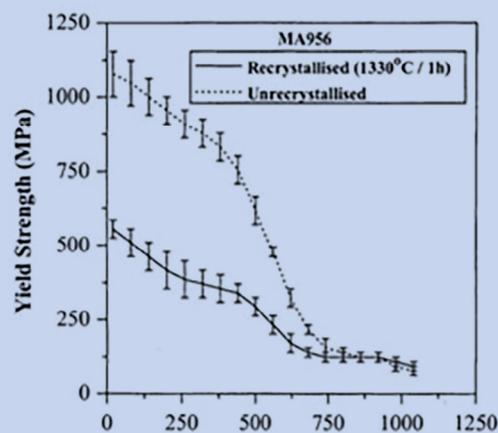


Figure 1 : Évolution en fonction de la température de la limite d'élasticité d'un acier. Les barres d'erreur représentent l'incertitude du modèle [BA98].

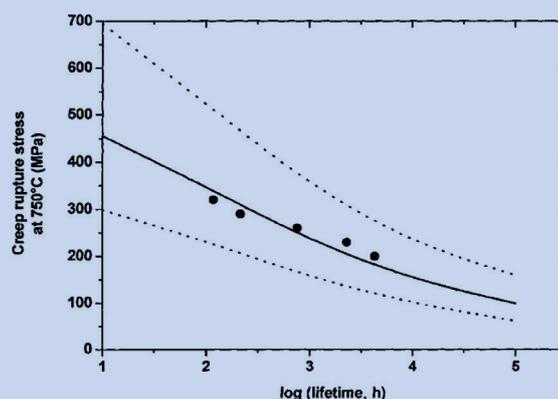


Figure 2 : Évolution de la contrainte de rupture en fluage en fonction de la température. Les disques sont les mesures ; la ligne représente la moyenne des prédictions et les pointillés leur erreur [TA03].

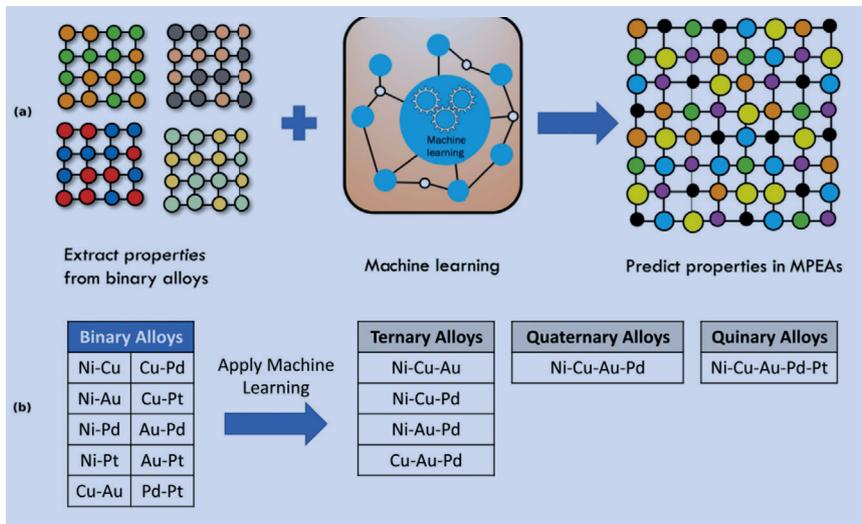


Figure 3 : Représentation schématique de l'usage de l'apprentissage statistique pour l'extrapolation de résultats de calculs ab initio sur des systèmes binaires à des systèmes d'ordre supérieur [L123]

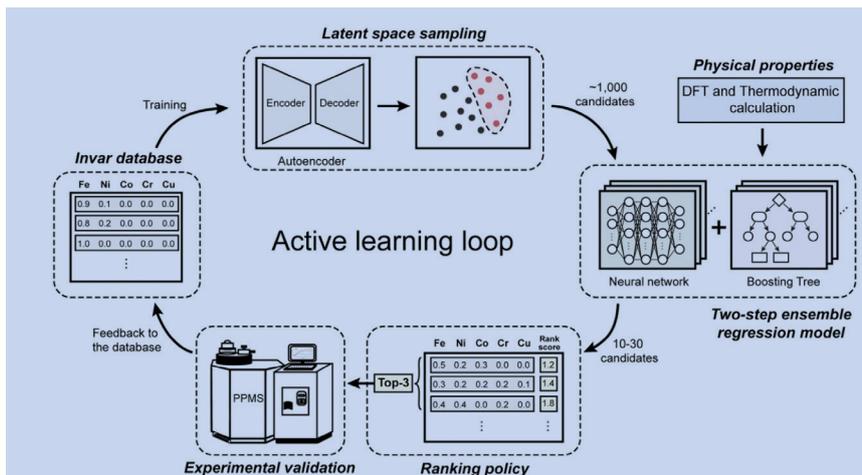


Figure 4 : Aperçu de la méthode « d'apprentissage actif » employée pour la conception d'alliages à forte entropie à bas coefficient de dilatation thermique [RA22]

de la performance d'un modèle prédisant la structure d'alliages à forte entropie [LE20]. Les réseaux de neurones « informés par la physique » (*Physics-Informed Neural Networks*, PINN) sont une autre illustration d'un couplage théorie-IA prometteur [CU22]. Dans un domaine expérimental tel que la conception d'alliages, l'usage de routines d'optimisation tels l'apprentissage actif

ou l'optimisation bayésienne revêt tout son sens. Dans ce cadre, l'optimisation consiste en un aller-retour itératif entre le numérique et l'expérimental, le second confirmant (ou infirmant) les prédictions du premier. Les travaux de Rao et al. en sont un exemple pour la conception d'alliages à forte entropie à bas coefficient de dilatation thermique [RA22]. Usant à la fois de modèles classiques (calcul des

diagrammes de phases et DFT) et de modèles d'IA (réseaux de neurones artificiels et *boosting tree*), la méthode en comprend la validation expérimentale qui nourrit de ses résultats la modélisation par IA dont la précision tend à augmenter avec le nombre de données. (Cf. figure 4) Les travaux de Kirk et al. comptent parmi ceux exploitant d'autres techniques d'exploration intelligente de l'espace des possibles [K121]. Les auteurs emploient une première routine détectant les domaines de phases à éviter (première moitié de la Figure 5) et une autre pour la planification du chemin à prendre dans le diagramme pour les éviter au cours de la construction par fabrication additive d'éprouvettes à gradient de composition (seconde moitié de la figure).

L'emploi combiné de l'IA et de la modélisation classique permet de gagner en temps de calcul; c'est également un des arguments des travaux de Ghoreishi et al. : les auteurs recourent à un algorithme optimisant non seulement la résistance et la ductilité d'aciers *dual phase*, mais minimisant également le nombre d'appels aux modèles physiques les plus coûteux telle la modélisation par éléments finis, en maximisant le recours aux modèles analytiques plus rapides [GH19].

Le recours croissant à des méthodes d'IA en science des matériaux invite au questionnement, notamment quant au partage de savoir-faire et de données dans la communauté, aux compétences à renforcer voire à développer, à la place des travaux expérimentaux et aux aspects environnementaux et éthiques.

Quelle que soit la technique, les données sont le nerf de la guerre. Il y a donc surtout des compétences à maintenir : celles qui contribuent à les générer, ce qui concerne aussi bien des profils expérimentateurs que numériques. Ceux-ci doivent cependant prendre conscience que, dans une logique de parcours exploratoire d'un espace gigantesque, l'IA fournit des outils réduisant la part de hasard, et que leurs résultats devront être versés à des collections globales qui seront le carburant d'une exploration efficace.

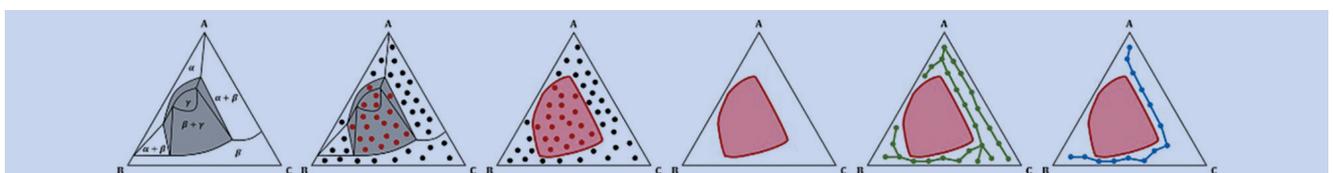


Figure 5 : Illustration du processus de sélection d'un chemin dans un diagramme de phases évitant des domaines délétères en vue de la construction par fabrication additive de matériaux à gradient [K121]

Ce partage voire désenclavement des données propres à chaque entité de recherche qui les acquiert est une voie suivie aux États-Unis au travers d'initiatives telle la *Materials Genome Initiative* [NA11]. Une traduction au domaine des batteries a par exemple été proposée [WA22] et laisse songeur quant à l'entame d'un « génome des alliages » dont la structuration reprendrait les principes de fusion de données brutes et de connaissances experts proposés par General Electric [AG22].

Les compétences à développer ne sont pas si nouvelles. Il s'agit surtout de ponts à créer entre disciplines : métallurgie et mécanique d'un côté (expérimentales et numériques) et statistiques, recherche opérationnelle, mathématiques, robotique, bio-informatique... de l'autre. En cela les profils mixtes, de formation initiale en sciences des matériaux avec une formation complémentaire en intelligence artificielle ou vice-versa, sont pertinents. Mais leur nombre ne peut être que réduit tant la différence d'efforts et de temporalités entre le traitement des données et leur acquisition est immense. À un ingénieur matériaux/IA, combien de techniciens et d'ingénieurs matériaux pour l'alimenter ?

Cela est d'autant plus vrai si l'on considère les développements expérimentaux nécessaires à un post-traitement rapide des données. Il ne sert à rien de recourir à des méthodes numériques « à haut-débit » si la validation expérimentale ne l'est pas, ne serait-ce que préliminairement. Ces développements regroupent aussi bien l'automatisation d'expériences existantes (mais toutes ne le sont pas) que la conception d'expériences dédiées, à échelle réduite de quantité, de temps, de coût. Là aussi, le mot clé est compromis et une perte de précision sera certainement à concéder

en faveur d'une cartographie plus ample de l'espace des possibles. D'ailleurs, si la pratique de ces « essais représentatifs réduits » ne se substitue pas à celle de la validation expérimentale dans le cadre de montées en maturité technologique classiques, elle pose justement la question de la capacité à prendre en compte l'effet d'échelle au plus tôt.

La jeunesse des réflexions quant à ces développements expérimentaux est une des raisons pour lesquelles comparativement peu d'exemples de validation expérimentale aidée par IA existent dans le domaine de la conception d'alliages. Les moyens usuels se prêtent généralement peu à l'accélération au sens entendu dans d'autres domaines de la science des matériaux desquels l'inspiration est peut-être à puiser : l'élaboration de matériaux en couches minces [LU19] ou la synthèse de composés inorganiques par voie poudre [SZ23] en sont des exemples.

Il faut également considérer que des frontières interdisciplinaires sont à ouvrir plus largement, par exemple au travers d'incitations financières dans le cadre de montages de projets collaboratifs. En la matière, la France fait en quelque sorte ses débuts avec le PEPR DIADEME (Dispositifs intégrés pour l'accélération du déploiement de matériaux émergents).

Les développements propres au domaine de l'IA ne sont pas en reste, mais peu sont spécifiques au domaine de la conception d'alliages. L'explicabilité des modèles d'IA fait actuellement l'objet de nombreux travaux qui visent à formaliser les choix opérés par le modèle. Si la validation expérimentale, et non les prédictions, restera le juge de paix pour le développement d'alliages, la prise en compte des biais des modèles est intéressante, car ils sont exploitables à des étapes antérieures, par

exemple pour l'extraction automatisée de données de la bibliographie [PO23].

Ces nouveaux usages interrogent. La consommation d'énergie, induite par l'entraînement et l'utilisation de modèles d'apprentissage, en particulier les réseaux de neurones profonds, est significative : mille appels à certains modèles exploités jusqu'à des dizaines de millions de fois par jour valent les émissions d'un véhicule diesel sur quelques kilomètres [LU23]. Les récents modèles généralistes, dont les modèles génératifs (d'images, de texte) tels OpenAI ChatGPT, sont bien plus énergivores que les modèles plus classiques de classification. Le coût environnemental de ces modèles multitâches est-il justifiable lorsque des modèles spécialisés, formulés pour des problèmes précis dont la conception d'alliages regorge, font parfois mieux pour nettement moins [LU23] ?

Enfin, nombre de modèles nécessitent pour leur entraînement des données dont la disponibilité est assurée par une main d'œuvre probablement largement sous-payée : ce fait est par exemple documenté dans une étude portant sur 2 600 travailleurs du service de « micro-travail » Amazon Mechanical Turk [HA18], service ironiquement dénommé « intelligence artificielle » par ses fondateurs [NY07]. Ce service a été utilisé pour la constitution de la base d'images ImageNet, l'une des plus fournies au monde [DE09]. L'usage de travailleurs délocalisés, rendus invisibles et évoluant hors des cadres juridiques propres aux pays de rattachement des groupes poussant le développement et l'adoption de grands modèles, est un sérieux écueil éthique qui devrait inviter, notamment dans le domaine de la conception d'alliages, à une certaine frugalité par ailleurs compatible avec la rareté des données du domaine. ■

Références

[AG22] Aggour, K. S. et al. (2022). *Integ. Mater. and Manufact. Innov.* 11(4) 467-478
 [AS01] Ashby, M., Bréchet, Y. & Salvo, L. (2001). EAN13 9782880744731
 [BA98] Badmos, A. Y. & Bhadeshia, H. K. D. H. (1998). *Mater. Sci. and Tech.* 14(8) 793-809
 [CU22] Cuomo, S. et al. (2022). *J. Sci. Comput.* 92 88
 [DE22] Deffrennes, G. et al. (2022). *Materials & Design* 215 110497
 [DE09] Deng, J. et al. (2009) *IEEE Conf. on Comp. Vision and Pattern Recognition*, 248-255
 [GH19] Ghoreishi, S. F. et al. A. (2019). *Acta Materialia* 180 260-271

[HA18] Hara, K. et al. (2018). arXiv.1712.05796
 [JO18] JORF n°0285 du 9 décembre 2018, texte n°58
 [KI21] Kirk, T. et al. (2021). *Journal of Mechanical Design*, 143(3) 031704
 [LE20] Lee, S. Y. et al. (2021) *Materials & Design* 197 109260
 [LI23] Linton, N. & Aidhy, D. S. (2023). *APL Machine Learning* 1(1)
 [LU23] Luccioni, A. S. (2023). arXiv.2311.16863
 [LU19] Ludwig, A. (2019). *npj Computational Materials* 5(1)
 [NA11] *Materials Genome Initiative for Global Competitiveness (2011)*. National Science and Technology Council

[NY07] New York Times (25/03/2007). *Artificial Intelligence, With Help From the Humans*
 [PO23] Polak, M. P. & Morgan, D. (2023). arXiv:2303.05352
 [RA18] *Rapport de la Task Force IA du ministère des Armées (2019)*
 [RA22] Rao, Z. et al. (2022). *Science* 378 (6615) 78-85
 [SZ23] Szymanski, N. J. et al. (2023). *Nature* 624(7990) 86-91
 [TA03] Tancret, F. et al. (2003). *Mater. Sci. and Tech.* 19(3) 296-302
 [WA22] Ward, L. et al. (2022). *Joule* 6(10) 2253-2271