

**Thèse DGA en coopération franco-britannique
Université de Nantes – Lancaster University**

***Conception computationnelle multi-critère
d'alliages de magnésium et de titane***

Dates :

- Démarrage en octobre 2017.
- Déroulement : environ un an à Lancaster puis environ deux ans à Nantes.

Laboratoires et encadrants :

- Au Royaume-Uni :
 - o Lancaster University, Department of Engineering
 - Co-directeur de thèse : Prof. Pedro RIVERA
- En France :
 - o Institut des Matériaux de Nantes – Jean Rouxel (IMN)
Université de Nantes et CNRS
 - Directeur de thèse : Prof. Franck TANCRET
 - Co-encadrant : Dr. Emmanuel BERTRAND
 - o Laboratoire des Sciences du Numérique de Nantes (LS2N)
Université de Nantes et CNRS
 - Co-encadrant : Dr. Gérard RAMSTEIN

Contacts :

Prof. Franck TANCRET
franck.tancret@univ-nantes.fr
+33 (0)2 40 68 31 97

Prof. Pedro RIVERA
pejr2@cam.ac.uk
+44 (0)1223 331 538

Sujet :

Problématique et objectifs applicatifs

Les alliages de magnésium ou de titane sont largement utilisés dans les applications où des combinaisons de haute résistance et de faible masse sont nécessaires. L'amélioration de leur performance passe notamment par l'augmentation de leurs propriétés mécaniques spécifiques, c'est-à-dire ramenées à leur densité. En outre, le coût des matériaux est une préoccupation majeure ; il en va de même des enjeux de développement durable (éco-conception, impact environnemental, recyclage...). Par ailleurs, l'approvisionnement en matières premières est également un enjeu critique, que ce soit en termes de disponibilité géologique (épuisement futur des ressources) ou en termes géostratégiques (gisements dans des pays à risque politique). La conception de nouveaux alliages plus performants et moins chers doit ainsi s'inscrire dans des démarches de respect de l'environnement et de durabilité de l'approvisionnement.

Par ailleurs, le lien entre matériau et procédé est également de première importance. Entre autres, la fabrication additive permet, outre la production de pièces aux géométries complexes, de minimiser la quantité de matière utilisée et ainsi d'économiser les ressources naturelles. Toutefois ce procédé fait le plus souvent appel à des alliages habituellement mis en œuvre par des procédés classiques (fonderie, forge), non nécessairement adaptés à la fabrication additive.

Le présent projet vise la conception d'alliages de magnésium et de titane, présentant des caractéristiques optimisées en termes de microstructure, de propriétés mécaniques, de coût et de maîtrise des ressources, certains de ces alliages pouvant notamment être spécialement adaptés à la fabrication additive.

Enjeux scientifiques et démarche de modélisation

Les propriétés mécaniques des alliages métalliques dépendent de leur microstructure, cette dernière étant elle-même conditionnée par leur composition et les procédés de mise en œuvre. Diverses stratégies seront utilisées lors de la thèse. Par exemple, de bonnes propriétés mécaniques sont le plus souvent obtenues dans les alliages de magnésium grâce à un renforcement par solution solide et par précipitation, avec par ailleurs une préoccupation forte consistant à limiter la croissance des grains. Les propriétés mécaniques des alliages de titane reposent quant à elles majoritairement sur le renforcement par solution solide et sur une microstructure pilotée par les transformations allotropique et structurale. Dans tous les cas la microstructure, qui conditionne les propriétés, possède un ensemble de caractéristiques, elles-mêmes fonction de l'histoire thermique via notamment des aspects thermodynamiques qui dépendent de la composition. Nous proposons d'utiliser un ensemble d'outils de modélisation, existants ou à développer, pour prédire ou estimer les caractéristiques des alliages de magnésium et de titane en fonction de leur composition, notamment :

- Thermodynamique prédictive (méthode « CALPHAD » = *CAL*culat*ion of PH*ase *Diagrams*) pour la prédiction des phases en présence, de leurs compositions, des températures de transformation, des chemins de solidification...
- Modèles cinétiques de transformations (précipitation...) pour l'établissement de diagrammes temps-température-transformation.

- Méthodes reposant sur les théories électroniques pour estimer les domaines de transformations structurales.
- Modèles de recristallisation et de croissance pour contrôler la taille des grains.
- Modèles liant composition, microstructure et propriétés mécaniques via la taille des grains (Hall-Petch), le renforcement par solution solide, par précipitation, par mélanges de phases, par mâclage...
- Fouille de données (« *data mining* » / « *machine learning* ») pour la prédiction des propriétés, via la recherche de corrélations entre composition et caractéristiques thermodynamiques, microstructurales, mécaniques, thermiques, etc.
- Établir, en fonction de la composition des alliages, des critères quantitatifs liés au coût, à l'impact environnemental et à la disponibilité géologique et géostratégique des ressources.

Stratégie de conception

Par ailleurs, les alliages modernes font appel à de vastes panoplies d'éléments d'addition possibles. L'espace des compositions potentielles est par conséquent gigantesque, et la conception de nouveaux matériaux pose un sérieux problème combinatoire qu'il est impossible de traiter de manière exhaustive dans des temps de calcul raisonnables. Ce problème sera traité à l'aide d'algorithmes génétiques multi-objectifs pour optimiser simultanément les propriétés mécaniques, le coût et des critères qui seront définis pour prendre en compte l'impact environnemental et la criticité d'approvisionnement.

Candidat(e)s recherché(e)s :

Les candidat(e)s recherché(e)s sont des étudiant(e)s de niveau M2 ou équivalent en science des matériaux, avec des connaissances de base en métallurgie (grandes catégories d'alliages, diagrammes de phases, microstructures, propriétés mécaniques...), d'assez bonnes notions de programmation et d'algorithmique, ainsi qu'un goût certain pour le travail théorique et sur ordinateur. La formation aux outils informatiques spécifiques sera assurée ; aucune compétence sur des outils informatiques particuliers n'est donc nécessaire.

Les candidatures doivent être envoyées au plus tard le 7 avril 2017.