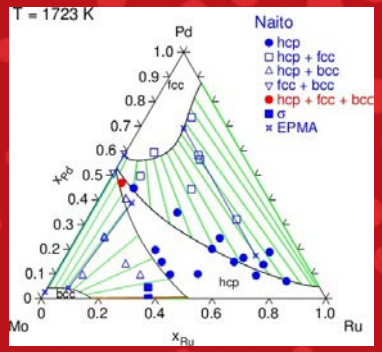


DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Découverte accélérée de matériaux au service de la durabilité en environnement

F. Balbaud-Célérier

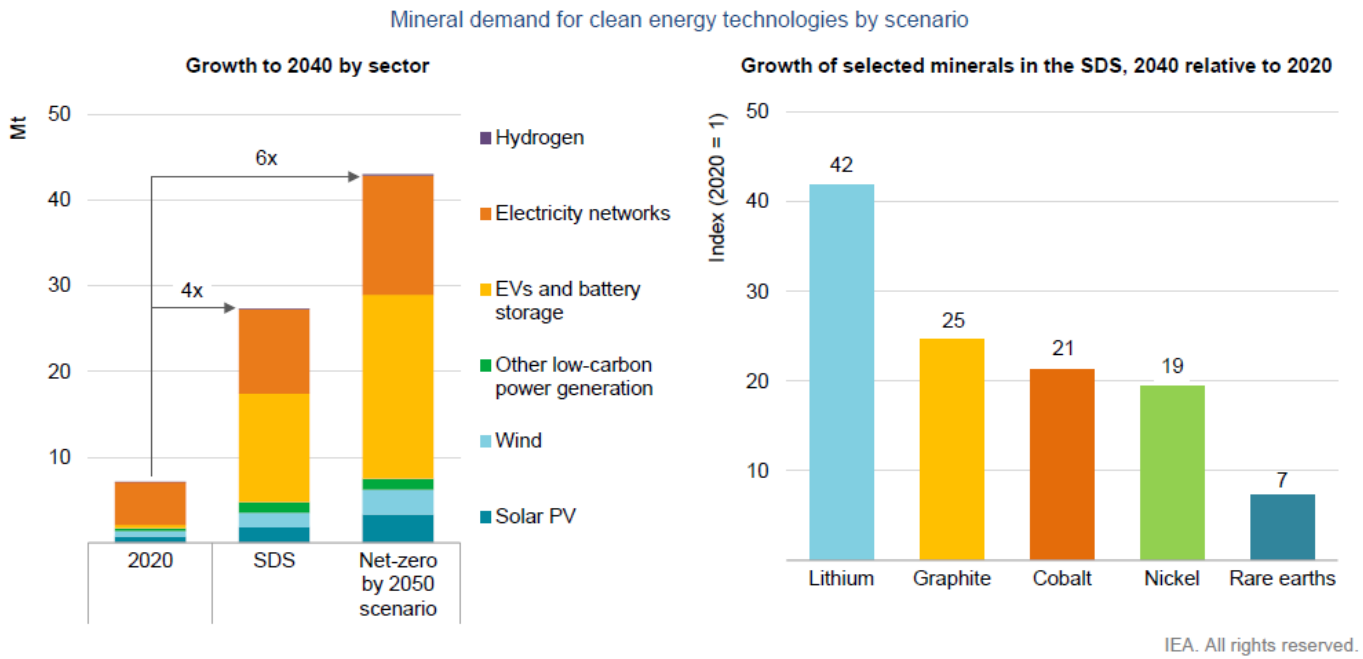
Université Paris-Saclay, CEA, Service de la Corrosion et du Comportement des Matériaux dans leur Environnement, 91191, Gif-sur-Yvette, France

Découverte accélérée de nouveaux matériaux – Pourquoi ?

▶ Demande en matériaux croissante :

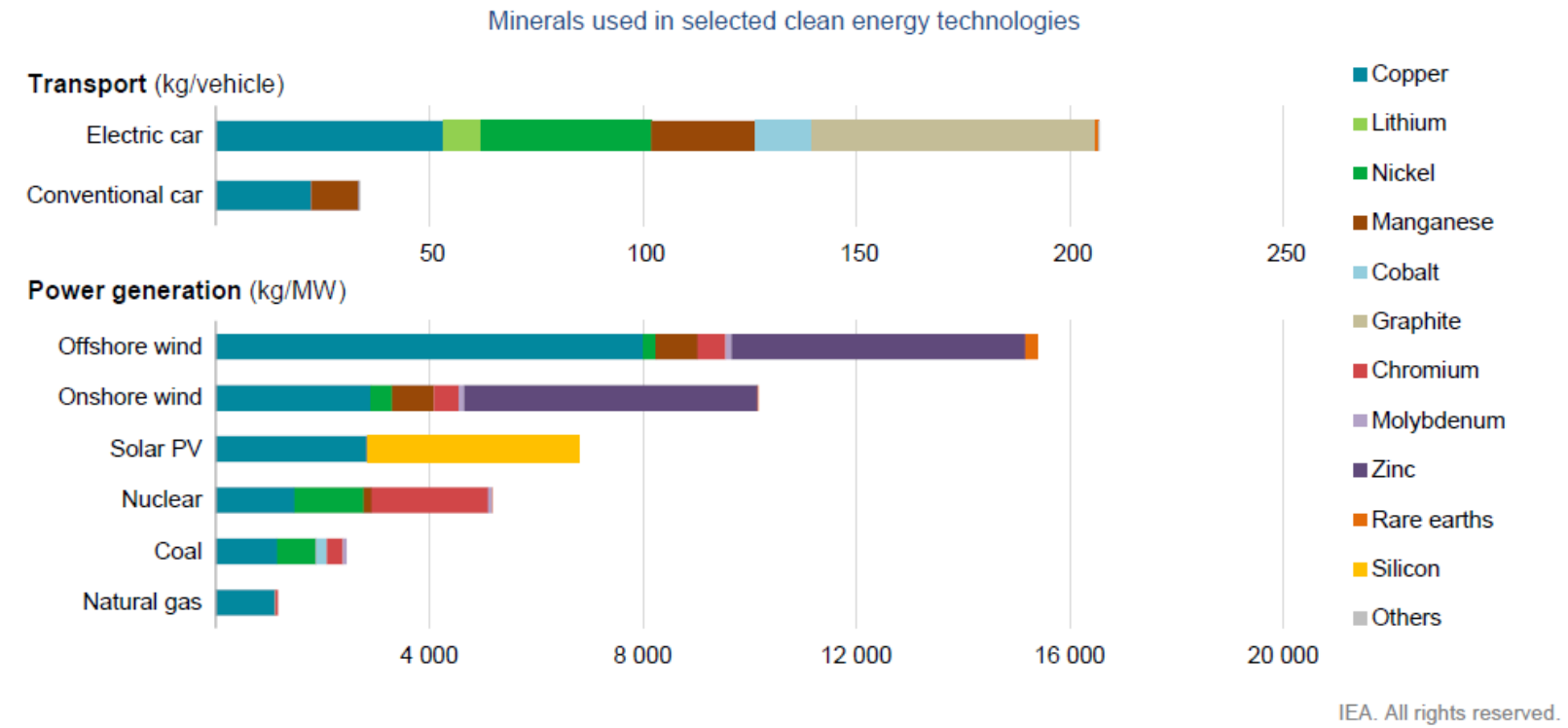
- Augmentation de la population mondiale avec une projection à 9,7 milliards d'habitants en 2050 et 11 milliards en 2100
- Complexité technologique nécessitant toujours plus de matière
- Réponses urgentes au changement climatique + besoins énergétiques croissants

SDS: Sustainable Development Scenario (in line with Paris Agreement).



IEA (2021), The Role of Critical Minerals in Clean Energy Transitions, IEA, Paris
https://www.iea.org/reports/the-role-of-critical-minerals-in-clean-energy-transitions

Besoins en ressources minérales selon les énergies



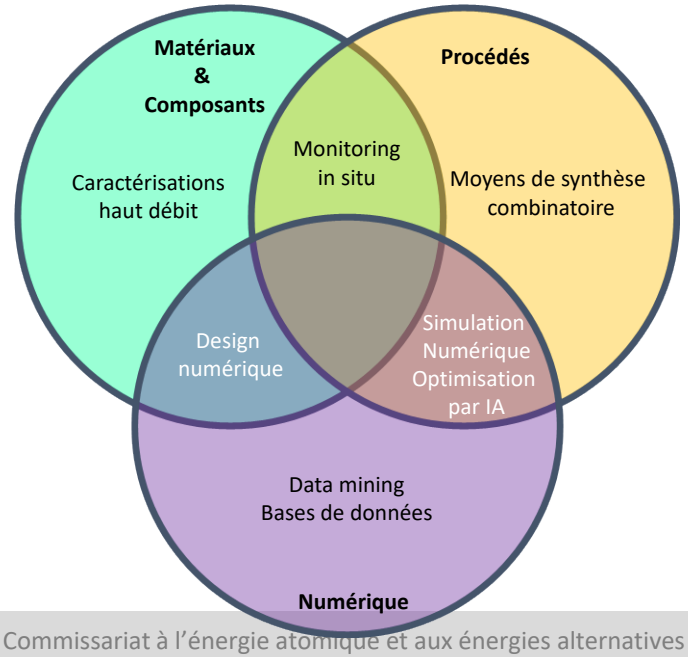
IEA (2021), The Role of Critical Minerals in Clean Energy Transitions, IEA, Paris https://www.iea.org/reports/the-role-of-critical-minerals-in-clean-energy-transitions

Besoin de matériaux durables et performants (notamment vis-à-vis de la corrosion)

- **Matériaux mieux conçus :**
  - Matériaux éco-conçus utilisant moins de matières toxiques, critiques
  - Matériaux plus performants vis-à-vis de l'utilisation finale : architecturés, fonctionnalisés (revêtements anticorrosion, marqueurs…), autoréparants…
  - Apport du numérique/IA sur la conception des matériaux/revêtements et la prévision du comportement en corrosion : couplage données issues du REX de la corrosion/data mining/machine learning + Approche thermodynamique (Calphad, DFT) + Modèles de corrosion
- **Mieux produits :**
  - Procédés avec des émissions plus faibles, plus économes en matière
  - Procédés à rendements élevés, plus intelligents (instrumentés et automatisés)
  - ⇨ Production de data issues de l'élaboration + optimisation des procédés au regard des propriétés visées
- **Mieux qualifiés :**
  - Caractérisation haut débit associée à l'élaboration de matériaux haute performance
  - Lois de comportement, mécanismes/modèles de corrosion (réduction des tests/développements)
  - ⇨ Data issues de la caractérisation des performances + optimisation vis-à-vis des procédés et de la conception
- **Mieux utilisés :**
  - Pendant leur service : instrumentés, intelligents, évolutifs
  - Après leur service : réparation, remanufacturing, recyclage, réutilisation
  - ⇨ Data issue de l'utilisation des matériaux et composants : modèles de corrosion

Découverte accélérée de nouveaux matériaux – Comment ?

- Approche intégrée du développement qui couvre l'ensemble de la chaîne : conception, fabrication, caractérisation de performances et qualification
- Intégration aux différentes étapes de cette chaîne de la modélisation, de la simulation numérique, et des méthodologies associées à l'intelligence artificielle (IA)
- Développement dans les technologies de synthèse/criblage et caractérisation à haut débit intégrant automatisation, robotisation, instrumentation
- Partage des données acquises (élaboration, caractérisation) pour permettre l'utilisation des techniques de fouilles de données, de machine learning et plus largement d'IA adaptées



Découvrir plus rapidement et à moindre coût de nouveaux matériaux performants (fonctionnels ou de structure)

Raccourcir les temps de développement des procédés émergents

Grâce à aux technologies digitales

Découverte accélérée de nouveaux matériaux – Le cahier des charges

- Extraction des ressources minérales via des procédés acceptables au niveau sociétal et environnemental
- Minimisation de ces ressources (stratégique/critique, toxique) et analyse du cycle de vie ⇨ réparation, récupération, recyclage
- Capacité à élaborer ces matériaux avec des procédés sobres
- Conception de matériaux ciblés et pour répondre à des cahiers des charges précis

⇨ **Accélération du développement de ces matériaux pour répondre aux enjeux énergétiques, environnementaux et économiques**

Materials Genome Initiative (2011) (USA) (+ Nuclear Materials Discovery and Qualification Initiative - 2020)	Mission Innovation (COP 21 - Accord de Paris 2015)	PEPR DIADEM (2022)
Accélérer le rythme de la découverte, le développement et déploiement de matériaux avancés	Accélérer l'innovation « matériaux » dans les énergies « bas carbone »	Accélérer la découverte de matériaux ⇨ transition énergétique, numérique, santé

https://www.mgi.gov/

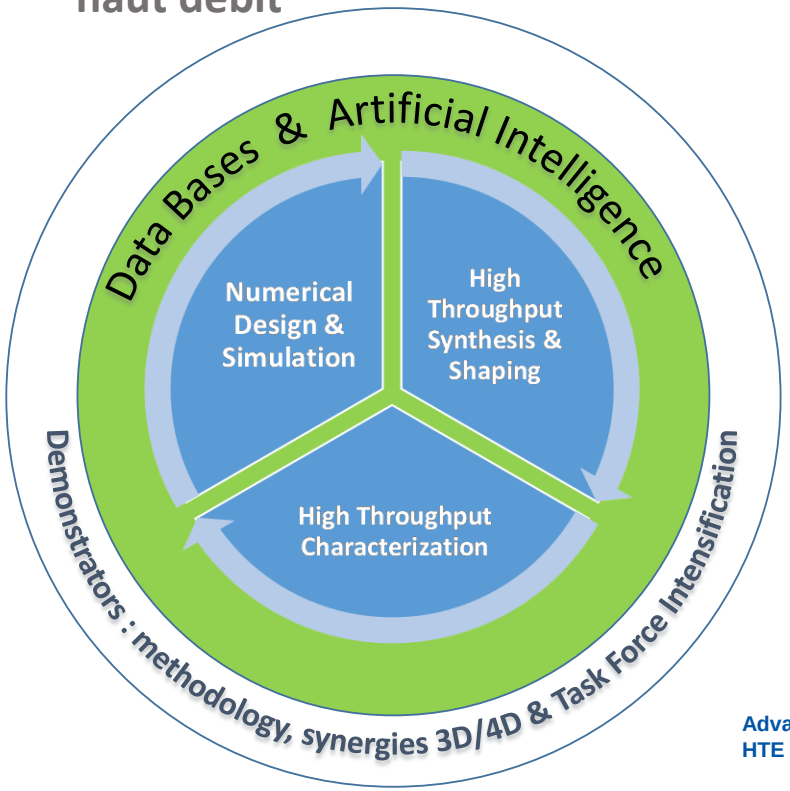
http://mission-innovation.net/our-work/innovation-challenges/clean-energy-materials/

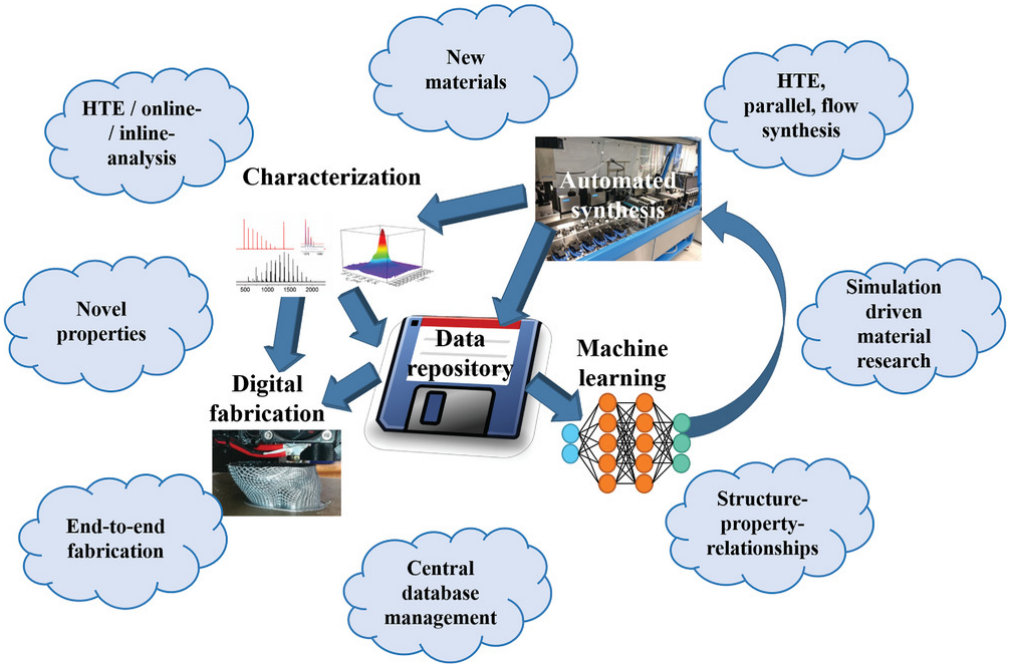
PEPR (Programme et Equipement Prioritaires de recherche) exploratoire DIADEME

Dispositifs **I**ntégrés pour l'**A**ccélération du **DE**ploiement de **M**atériaux Emergents

DIscovery **A**cceleration for the **D**eployment of **EM**erging materials

- **Montant total : 84 M€ - Durée : 8 ans**
- **Objectif : identifier des matériaux innovants, performants, durables, issus de matières premières non critiques et non toxiques, en réponse à des spécifications données, avec une rapidité inaccessible à la démarche purement expérimentale**
- **Moyen : Intégrer modélisation, simulation numérique, méthodologies associées à l'intelligence artificielle (IA), technologies de synthèse/criblage et caractérisation à haut débit**

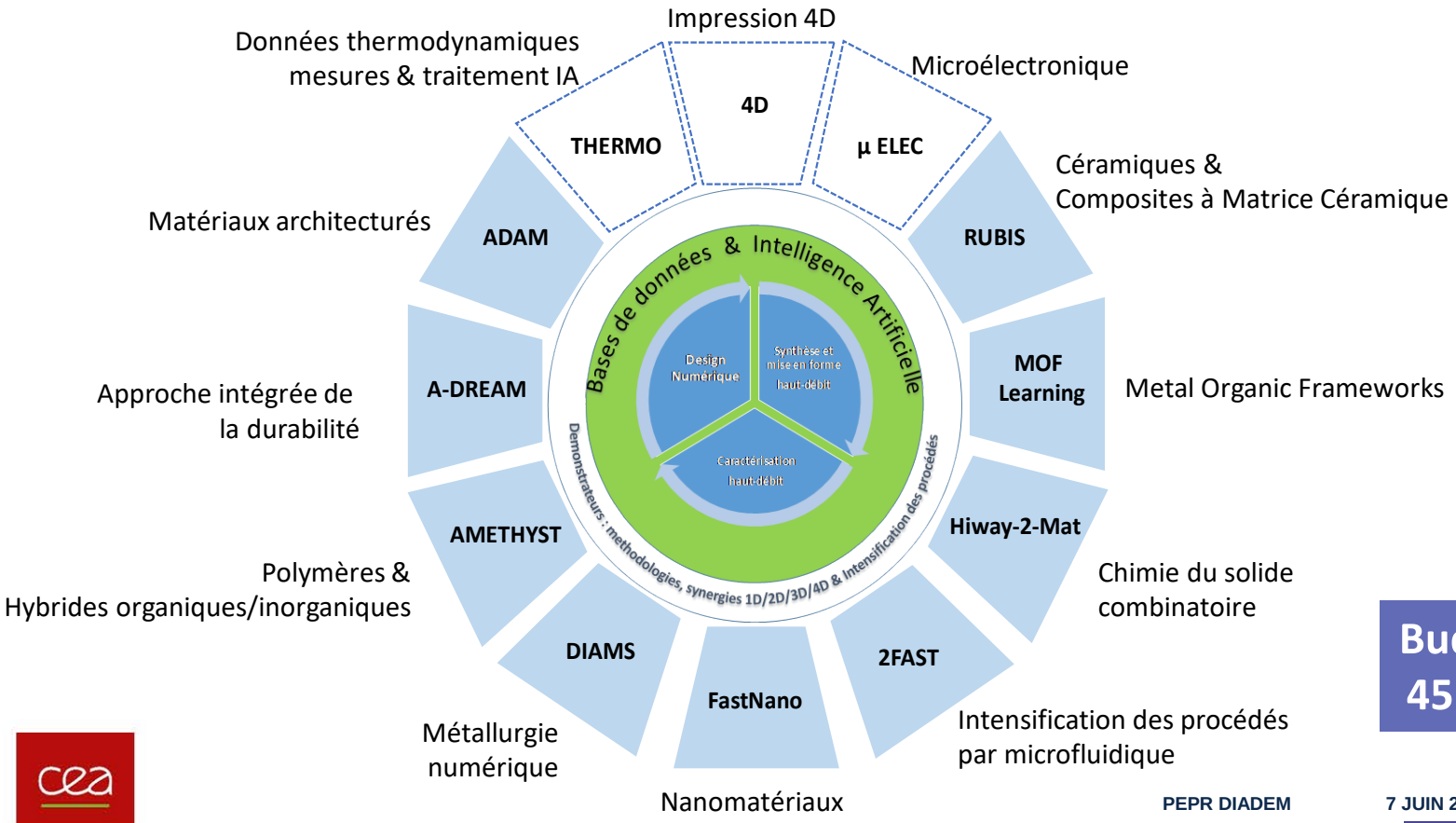




Advanced Materials, Volume: 33, Issue: 8, First published: 06 January 2021, DOI: (10.1002/adma.202004940)
HTE : High Throughput Experimentation

PEPR DIADEME – une première série de projets ciblés (durée 3 ans) avant des AAP ouverts

PROJETS CIBLÉS DE DÉMONSTRATION
PLATES-FORMES OUVERTES ASSISTÉES PAR L'IA AU CŒUR DU DISPOSITIF

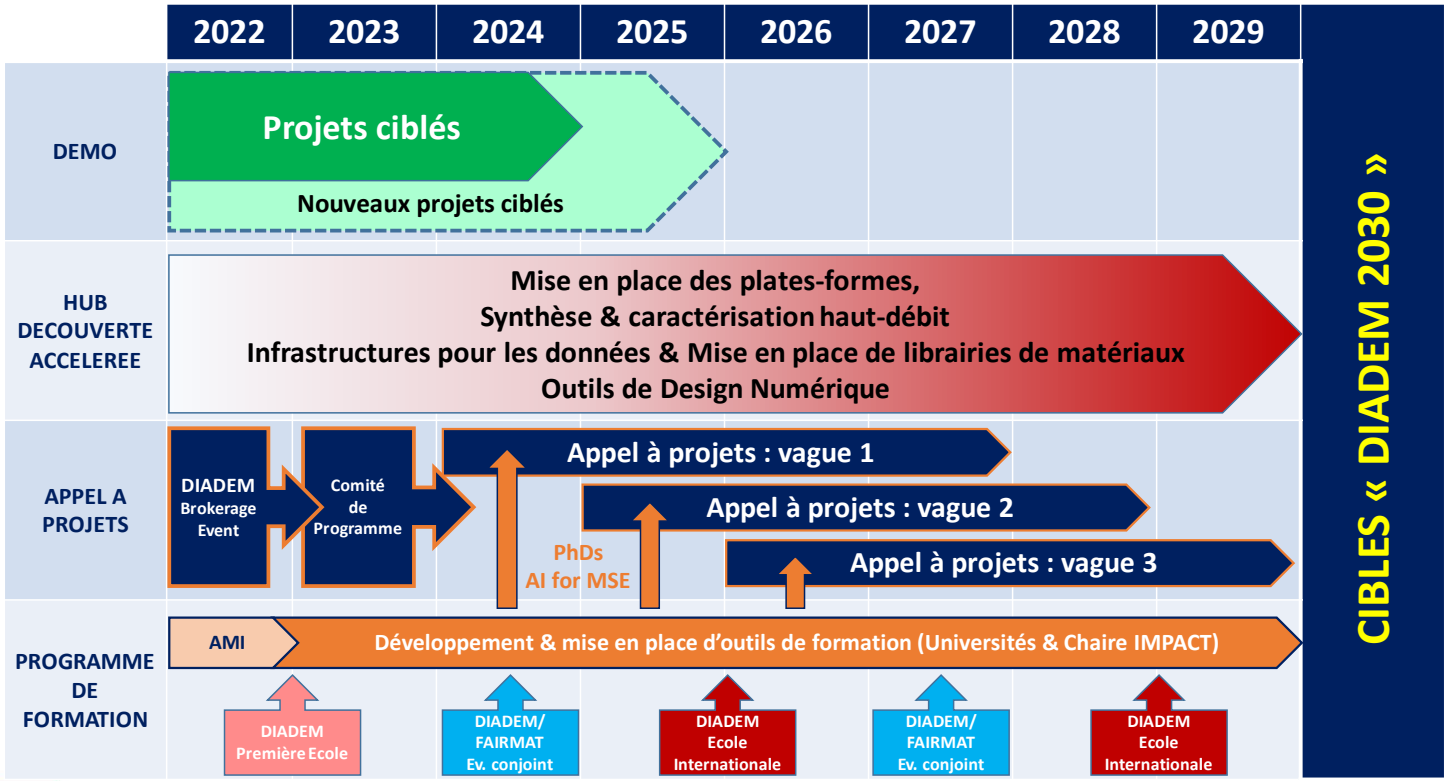


Budget 45 M€

PEPR DIADEM 7 JUIN 2022

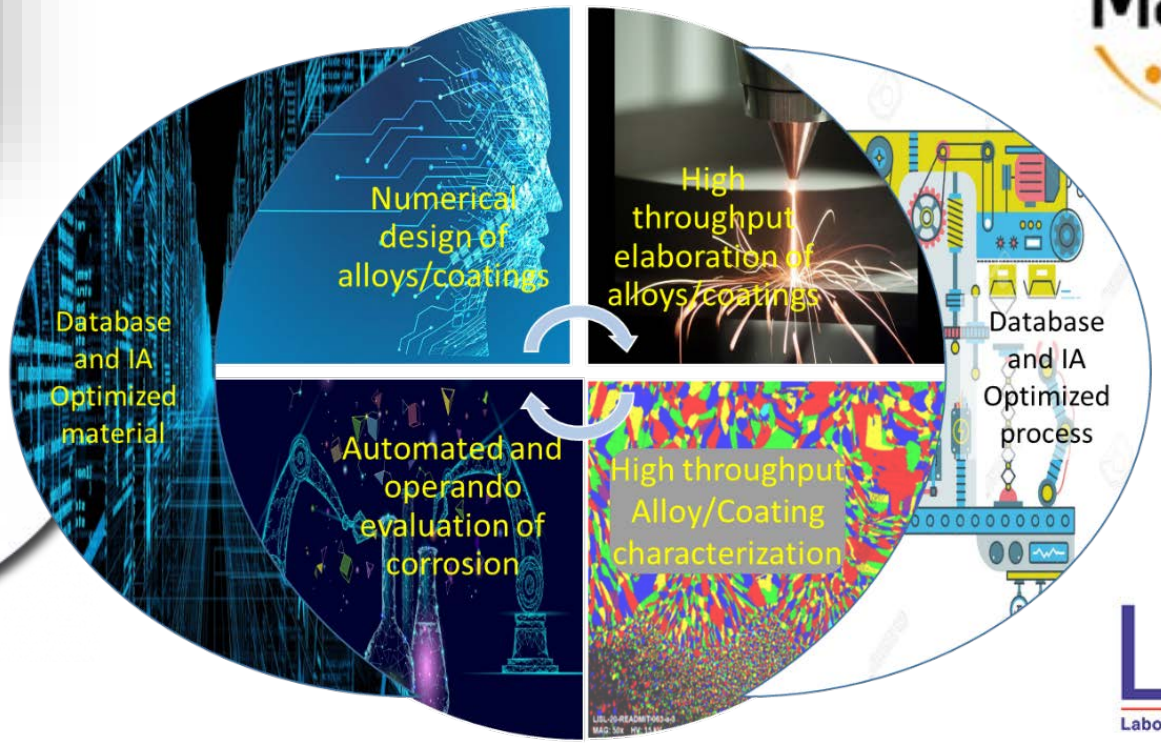
@PEPR DIADEM, M. Maglione, F. Schuster, A. Legris

PLANNING GLOBAL DU PEPR DIADEM



@PEPR DIADEM, M. Maglione, F. Schuster, A. Legris

A-DREAM Project
Accelerated Development of corrosion REsistAnt Materials



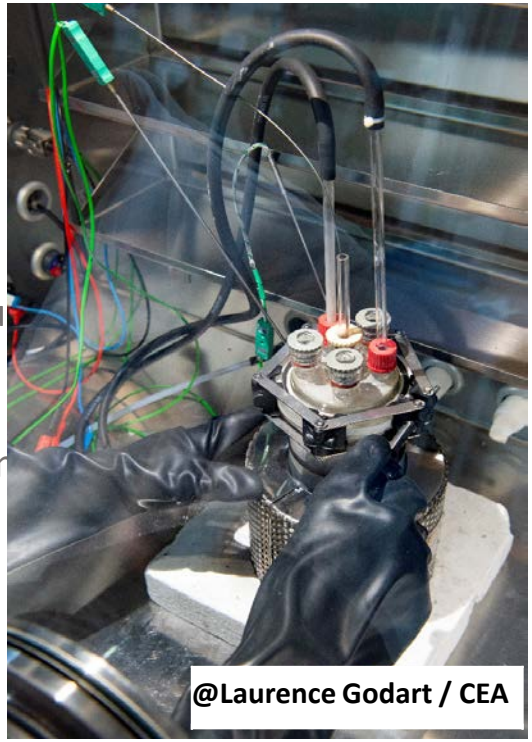
Projet ciblé A-DREAM - Objectifs

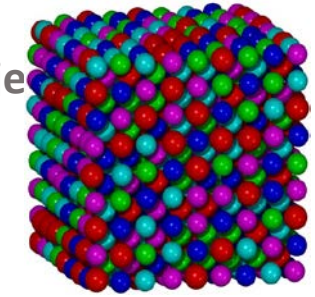
- **Développement accéléré de matériaux/revêtements à haute performance en terme de durabilité en environnement et minimisant les éléments toxiques et critiques**

- **Mise en œuvre d'une approche intégrée couplant :**
  - Conception numérique de matériaux/revêtements : données issues du REX de la corrosion/data mining/machine learning + Approche thermodynamique (Calphad, DFT) + Modèles de corrosion
  - Synthèse de ces matériaux à haut débit : PVD combinatoire, fabrication additive combinatoire, synthèse conventionnelle
  - Mise en œuvre de tests de corrosion accélérés :
    - Plateforme d'essais de corrosion pour criblage de compositions
    - Plateforme intégrée de corrosion couplant : électrochimie et techniques analytiques permettant criblage et évaluation du comportement long terme des matériaux

- **Matériaux : alliages base nickel, matériaux à haute entropie (projet DIAMS), revêtements PVD/verre pour criblage, revêtements Cold Spray (MATEIS, Lyon) pour caractérisation performances**

- **Milieu : chlorures fondus à haute température pour des applications dans le domaine de l'énergie : réacteurs nucléaires, stockage de la chaleur, solaire à concentration**





Les atomes d'Al, Fe, Co, Cr, Ni, Mn, et Cu sont en rouge, magenta, vert, bleu, cyan, jaune et gris

BCC AlCoCrFeNi

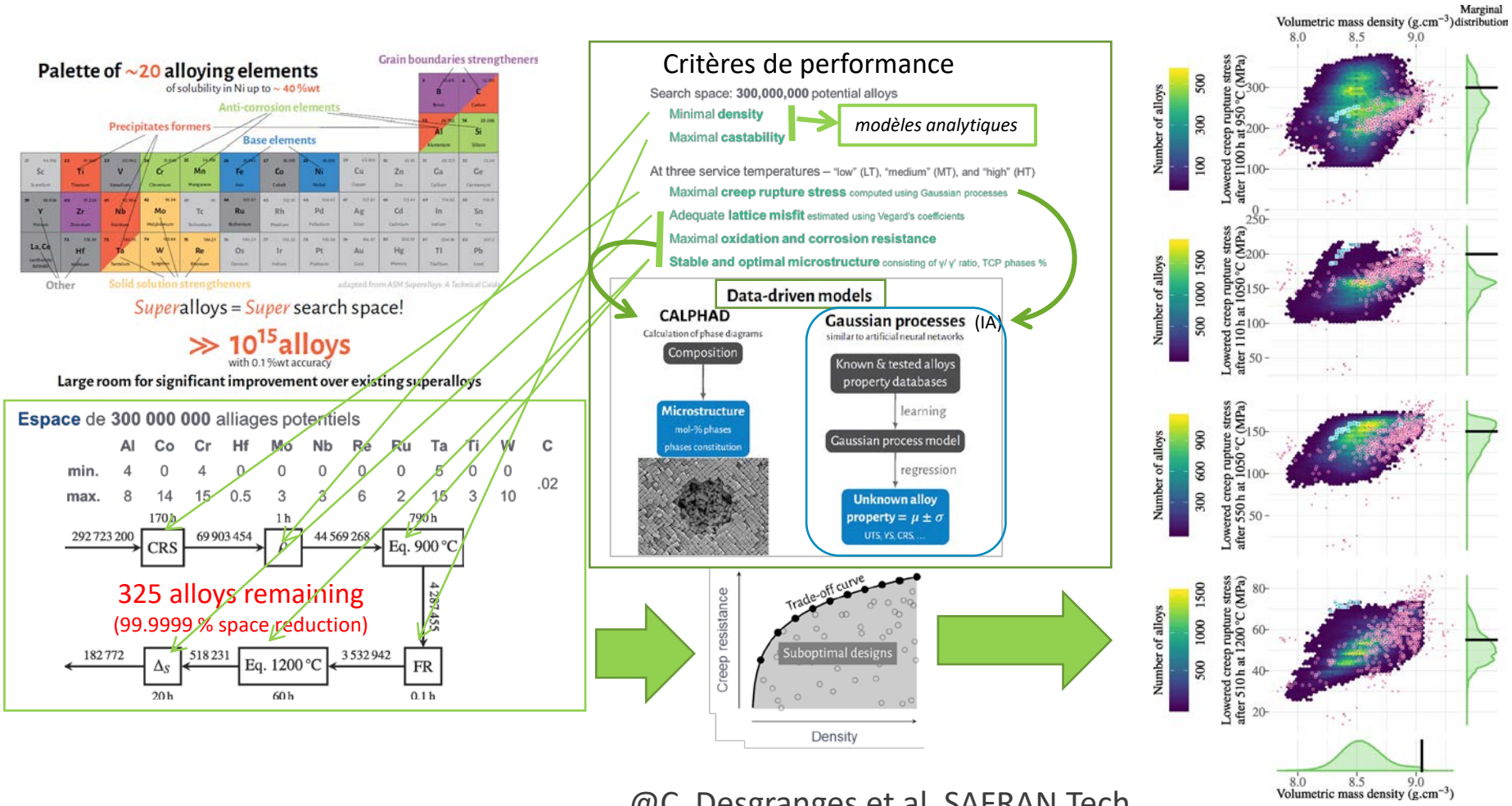
S. Wang et al, Entropy 15 5536-5548 (2013)

Project A-DREAM - Organisation

- **WP1 – Numerical design of materials/coatings + use of artificial intelligence for the analysis o corrosion data + machine learning to better assess the parameters affecting corrosion – Main contributors: IMN, ICMCB**
  - Definition of corrosion resistance criteria based on data mining, CALPHAD, DFT calculations, corrosion models
  - Algorithmic optimisation with AI for alloy design
- **WP2 - Intensified elaboration of materials and coatings and high throughput characterization – Main contributors: CEA, MATEIS**
  - Elaboration of multiple chemical composition with combinatorial PVD for corrosion testing
  - Cold Spray development for thick corrosion resistant coatings development ⇨ Combinatorial Cold Spray
- **WP3 - High throughput characterisation for corrosion evaluation– Main contributors: CEA, MATEIS, LRS, IJCLab**
  - Development of technological bricks for the corrosion behavior (including long term): electrochemical measurements + chemical analyses
  - Multiple screening of compositions through the development of a “simplified” testing device
  - Final integration in a global corrosion testing device

Optimisation **multi-critères** par calculs massifs (*high-throughput calculations*)

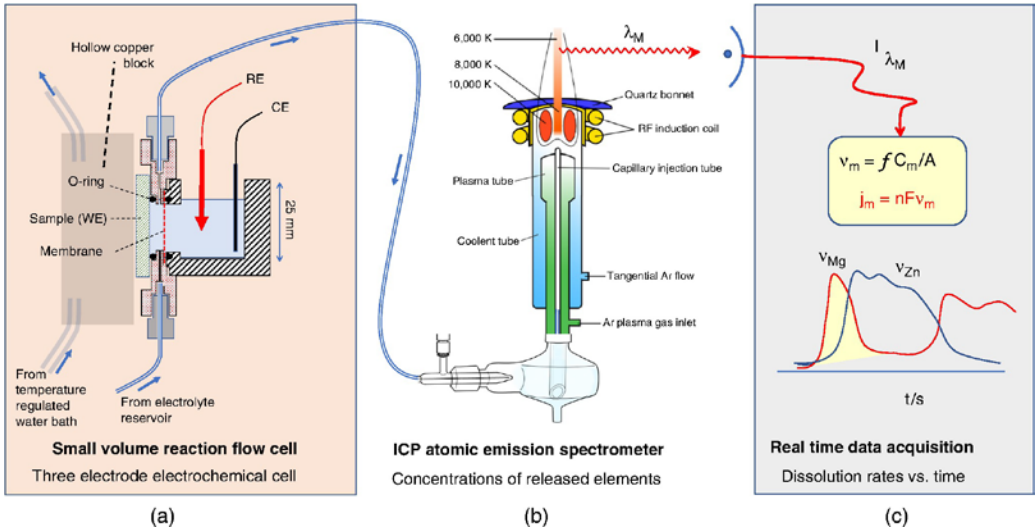
E. Menou J. Rame, C. Desgranges, G. Ramstein, F. Tancret *Computational Materials Science* 170 (2019) 109194



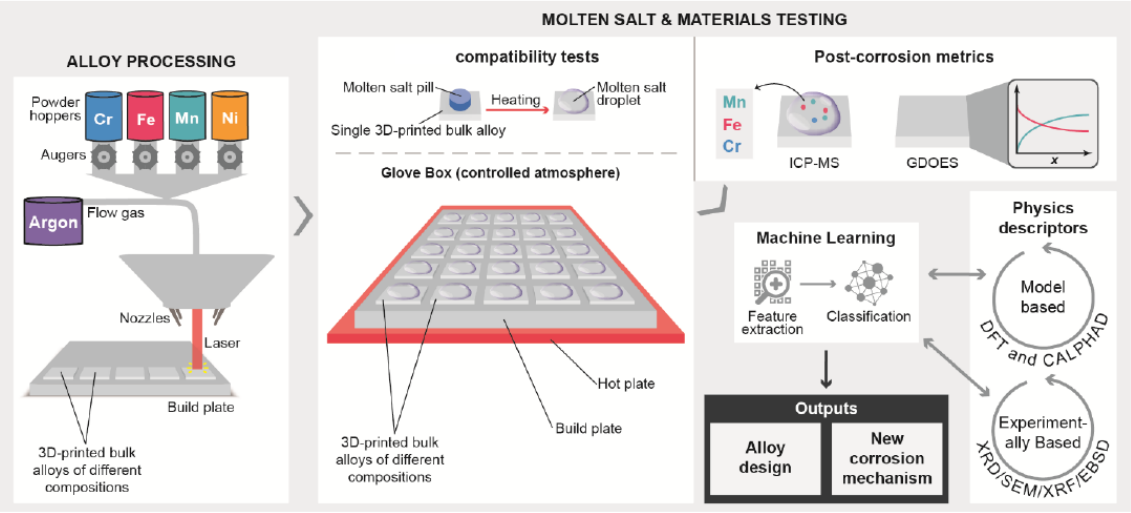
@C. Desgranges et al, SAFRAN Tech

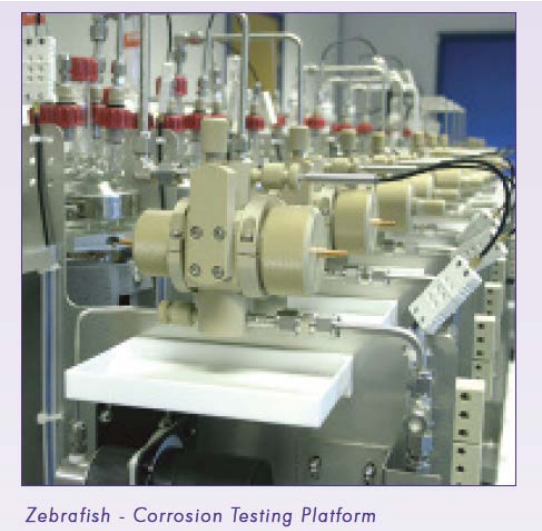
Projet A-DREAM – WP3 High throughput characterisation of corrosion

- **WP3 - High throughput characterisation for corrosion evaluation– Main contributors: CEA, MATEIS, LRS, IJCLab**
  - Development of technological bricks for the corrosion behavior (including long term): electrochemical measurements + chemical analyses
  - **Multiple screening of compositions through the development of a "simplified" testing device ⇨ SCCME**
  - Final integration in a global corrosion testing device



CORROSION. 2019;75(12):1398-1419. doi:10.5006/3336




Zebrafish - Corrosion Testing Platform

http://www.crduk.com/

Y. Wang et al, University of Wisconsin, April 2021 https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/2104/2104.10235.pdf