

# Modèles de Structures Aléatoires et Micromécanique

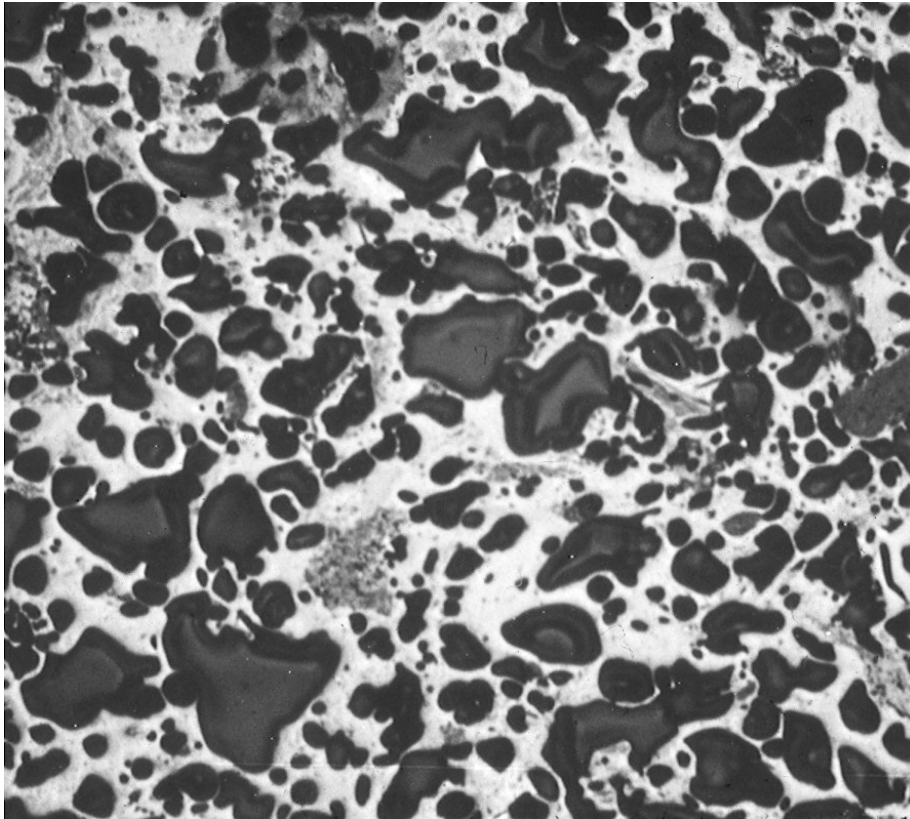
*Dominique Jeulin*  
*dominique.jeulin@ensmp.fr*



Centre de Morphologie Mathématique  
CFMR, Paris, 13-03-2008

Dominique Jeulin

# Origine - Motivations



$L = 1 \text{ mm}$

- Comment caractériser la **morphologie** d'un milieu poreux?
- Comment prévoir le **comportement macroscopique** d'un milieu poreux (composition des perméabilités)?
- **Représentation** d'un milieu poreux par un modèle?
- **Représentativité** d'un domaine Fini (**VER**)
- **Fluctuations** (propriétés macro, Rupture...)



# Introduction

- Analyse morphologique
- Microstructures aléatoires
- Micro-Macro: Changement d'échelle (homogénéisation, rupture)
- Matériaux Numériques – VER – Multi-échelle



# Analyse Morphologique

- Critères morphologiques
  - Taille
  - Forme
  - Répartition
  - Connexité
- Critères probabilistes
  - Lois de probabilité (n points,  $\sup_K$ )
  - Moments
- Implémentation par Analyse d'images



# Images 3D

- Microscope optique confocal
- Microtomographie

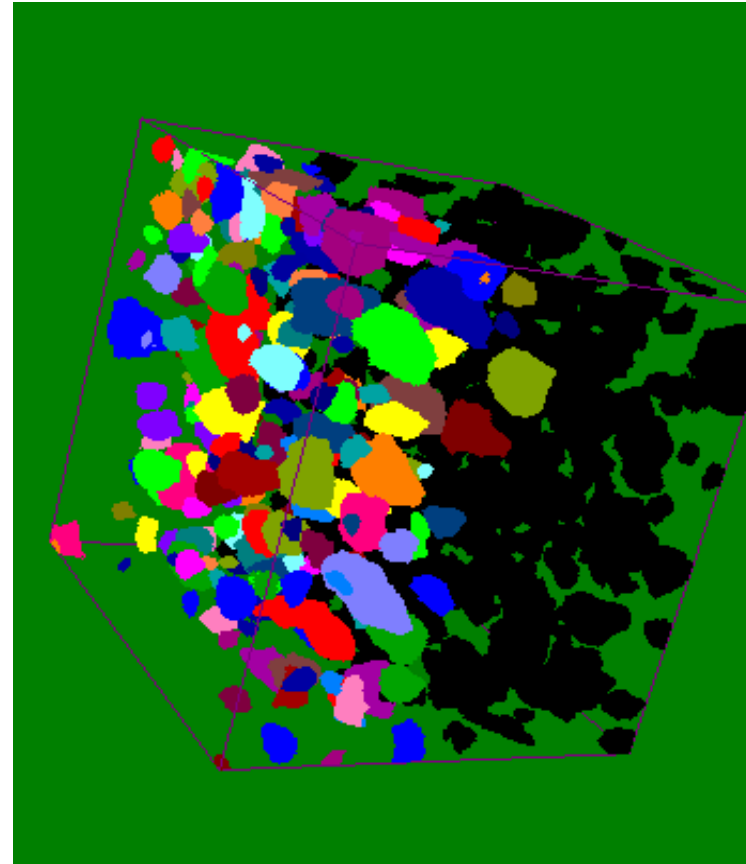
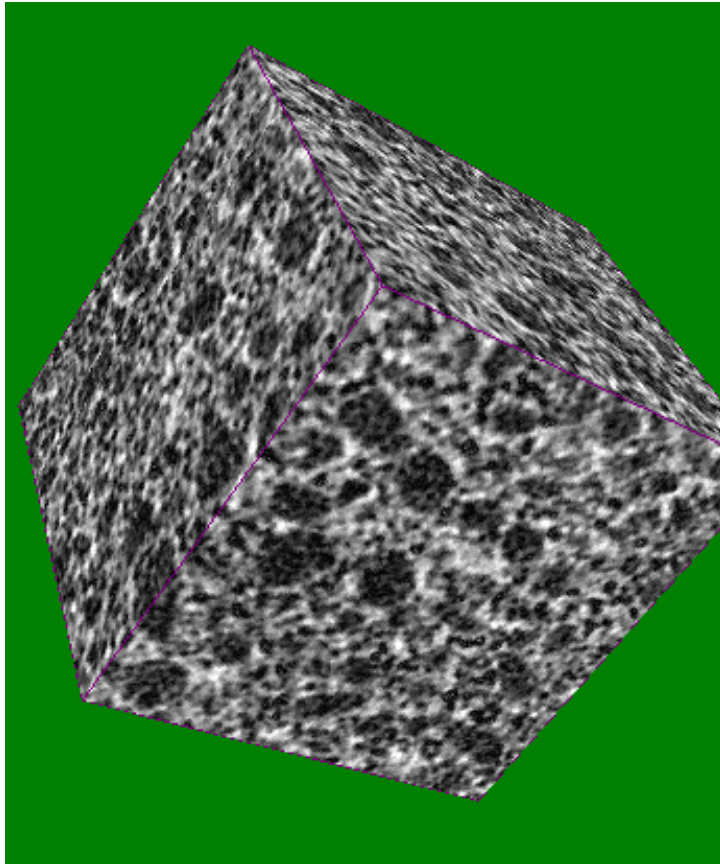


# Analyse d'Images 3D

Image 3D segmentée ( $300 \times 300 \times 284$ )

DGA

CEG



# Microstructures aléatoires



Centre de Morphologie Mathématique  
CFMR, Paris, 13-03-2008

Dominique Jeulin

# Types de Modèles

- Processus ponctuels (germes, défauts)
- Partitions aléatoires (polycristaux, mousses...)
- Ensembles aléatoires (biphasés, multiphasés)
- Fonctions aléatoires scalaires ou multivariables





# Caractérisation d'un ensemble aléatoire

9

- Capacité de Choquet de  $A$ . Pour tout compact  $K$ :  
$$T(K) = P\{ K \text{ rencontre } A \}$$
- Equivalent de la loi de probabilité pour une variable aléatoire
- Calcul théorique pour un modèle
- Estimation par analyse d'images (sur données de microstructure, ou sur simulations); identification de modèle
- Accessible à partir d'une seule réalisation pour un ensemble aléatoire stationnaire et ergodique

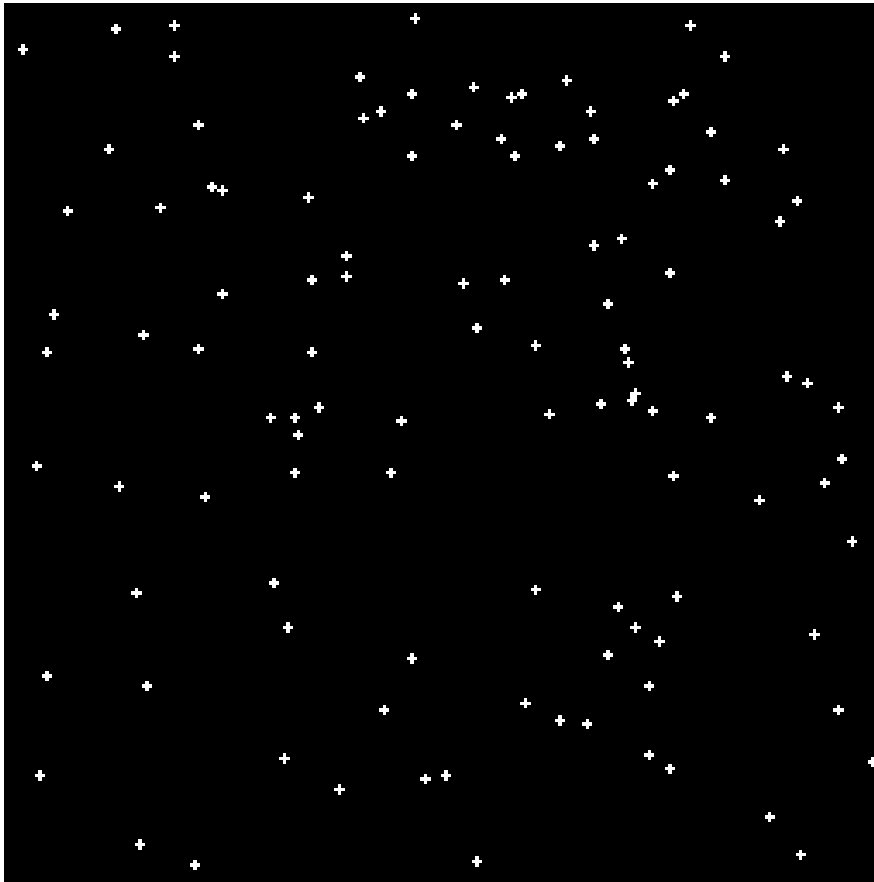


# Modèles de Processus Ponctuels

- Point de départ de nombreux modèles
- Processus ponctuel de Poisson: désordre complet (densité constante ou régionalisée)
- Processus de Cox (densité: fonction aléatoire; exemple multi-échelle)



# Processus ponctuel de Poisson



$N(K)$ : variable

Aléatoire de

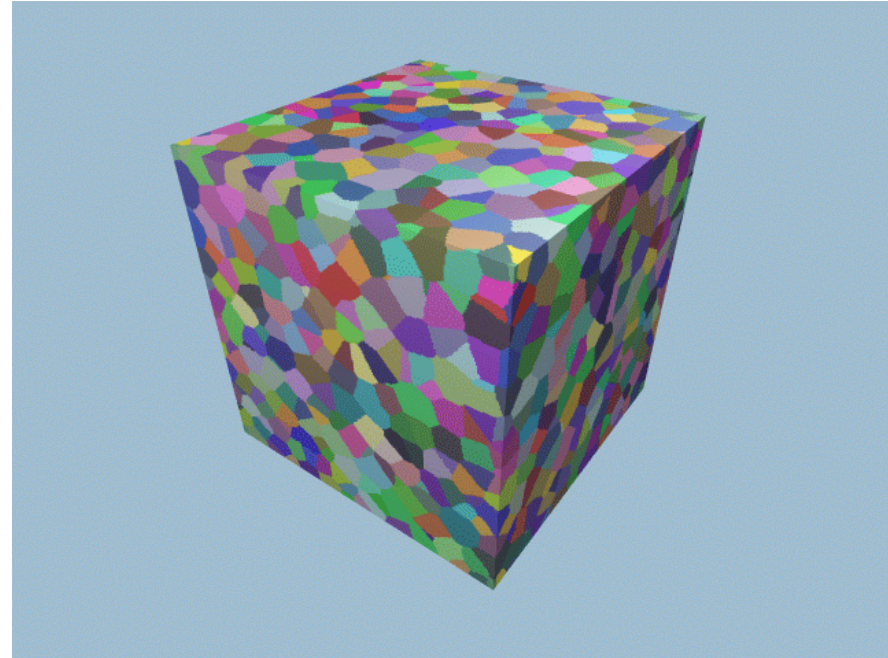
Poisson de

Moyenne  $\theta(K)$



# Modèles de Partitions Aléatoires

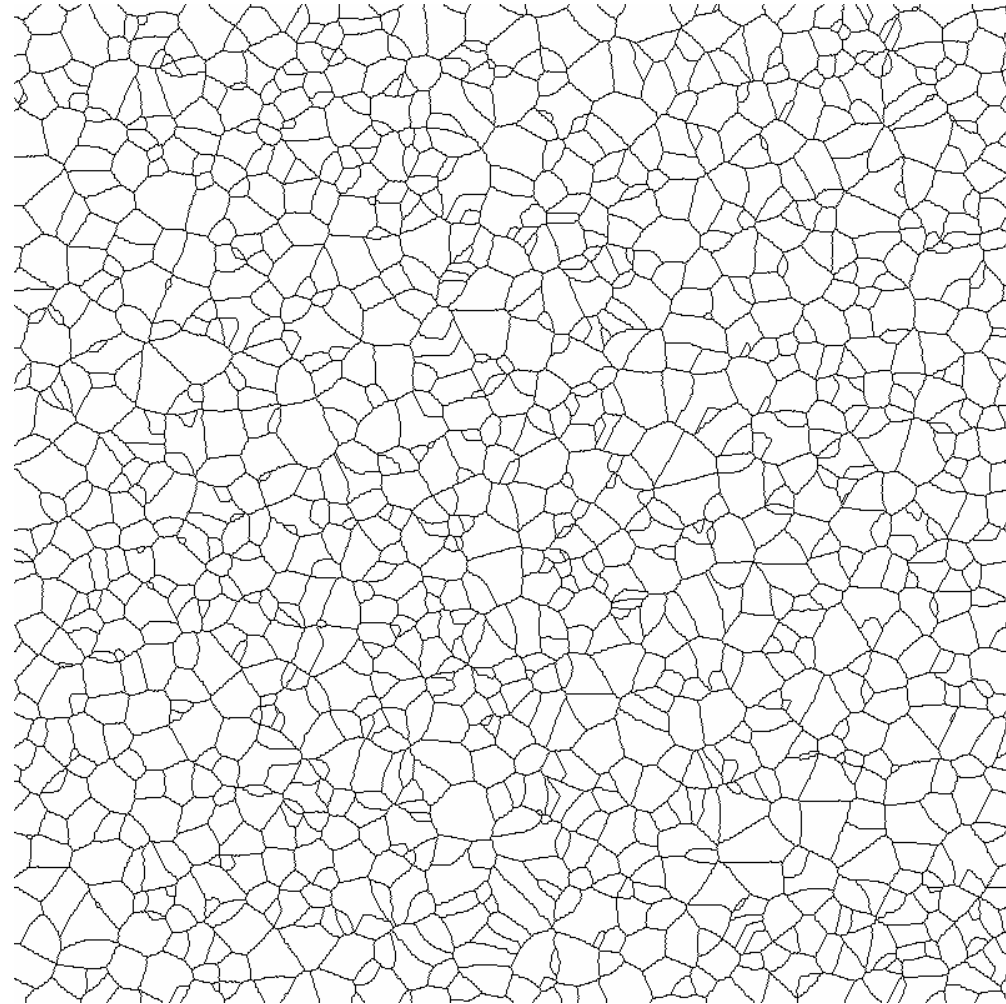
- Partition de Voronoï



- Partition de Johnson-Mehl
- Partitions hiérarchiques

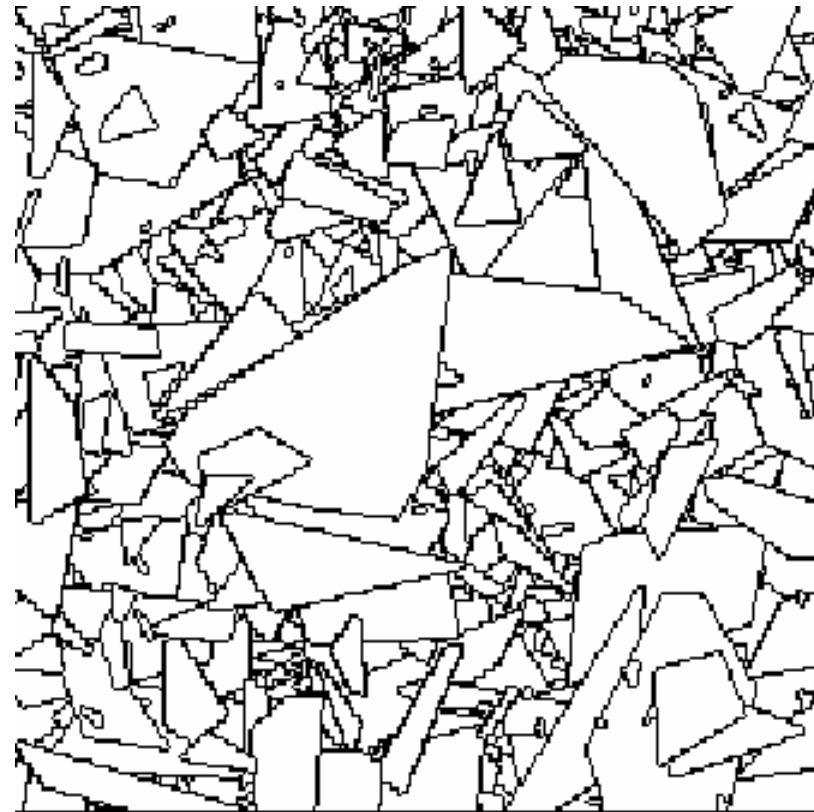
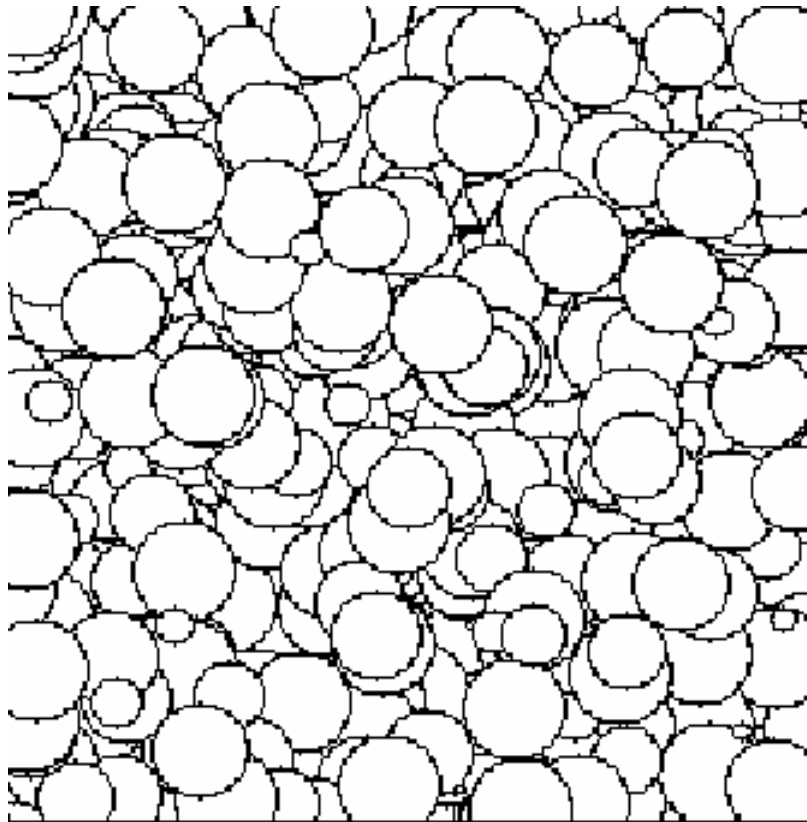


# Partition Aléatoire de Johnson-Mehl



# Partitions Aléatoires de Feuilles Mortes (G. Matheron, 1968)

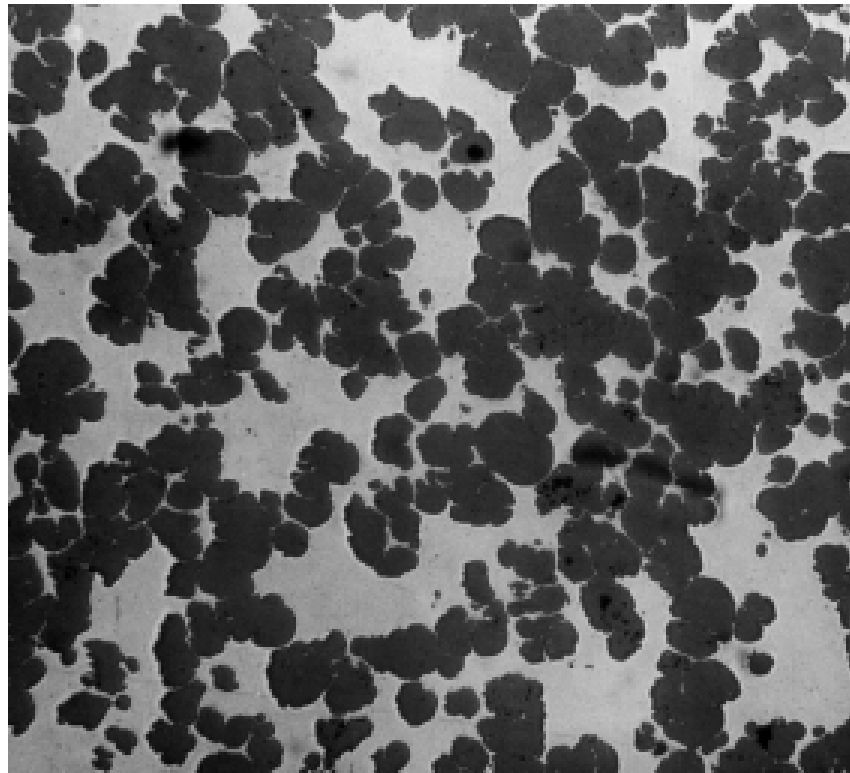
14



Centre de Morphologie Mathématique  
CFMR, Paris, 13-03-2008

Dominique Jeulin

# Schéma Booléen (G. Matheron, 1967)



Alliage Fe-Ag

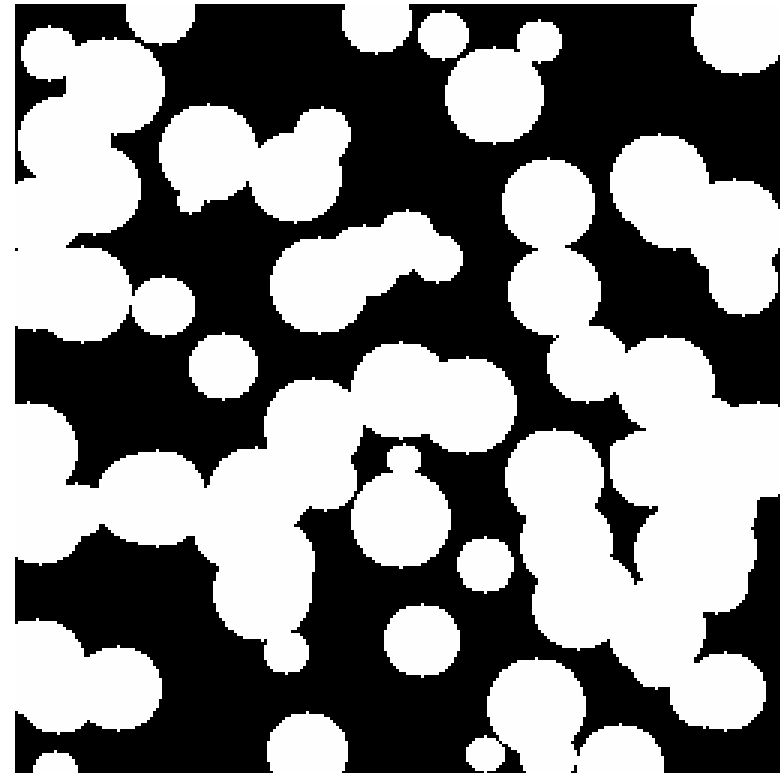
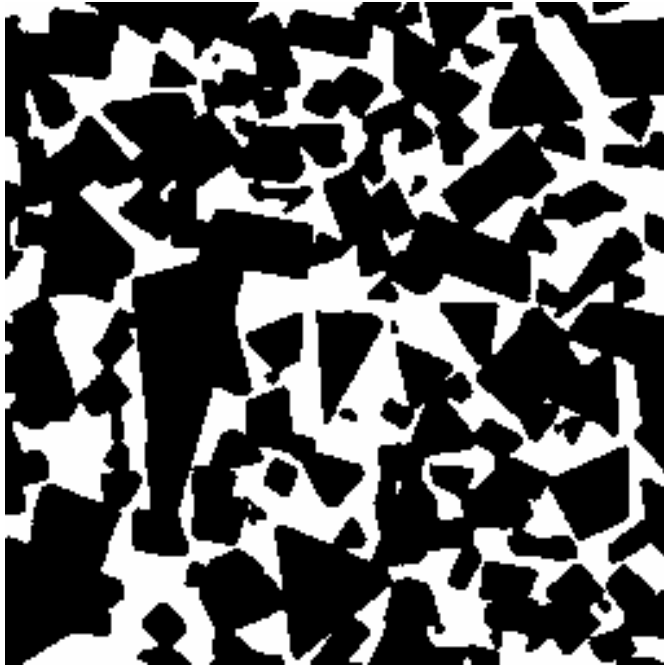


Schéma Booléen de Sphères (0.5)



# Schéma Booléen



WC Co (J.L. Chermant,  
M. Coster, J.L. Quennec 'h  
et D. Jeulin)  $L = 40 \mu\text{m}$

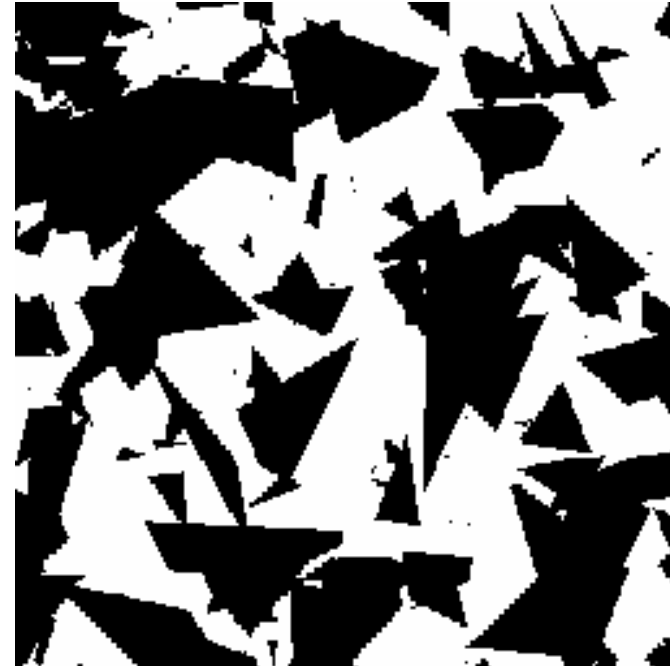
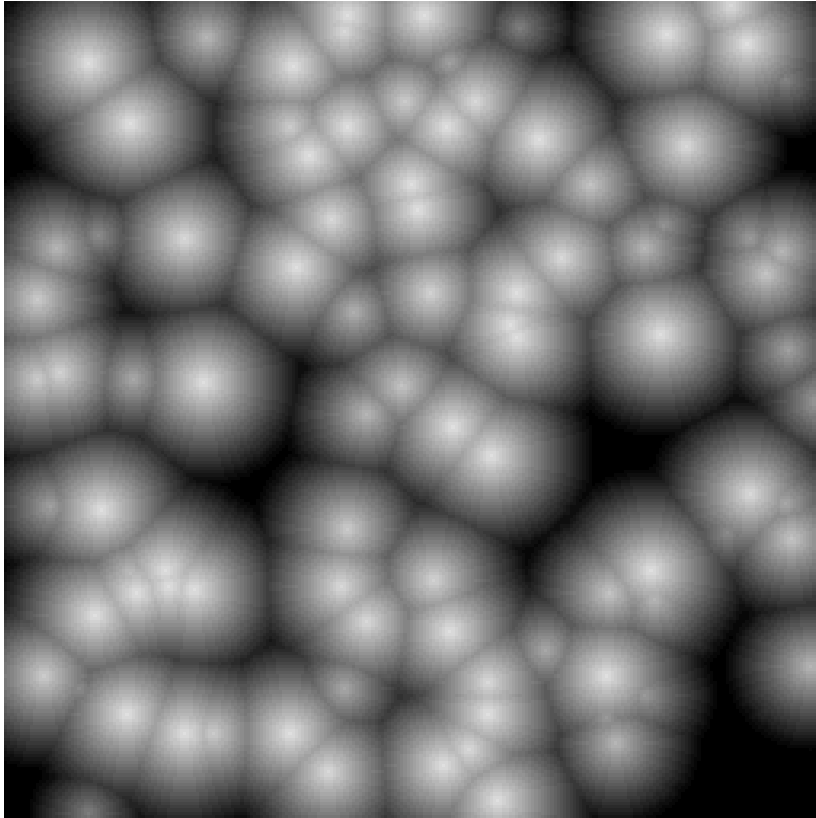


Schéma Booléen- Poissonien  
(P. Delfiner)

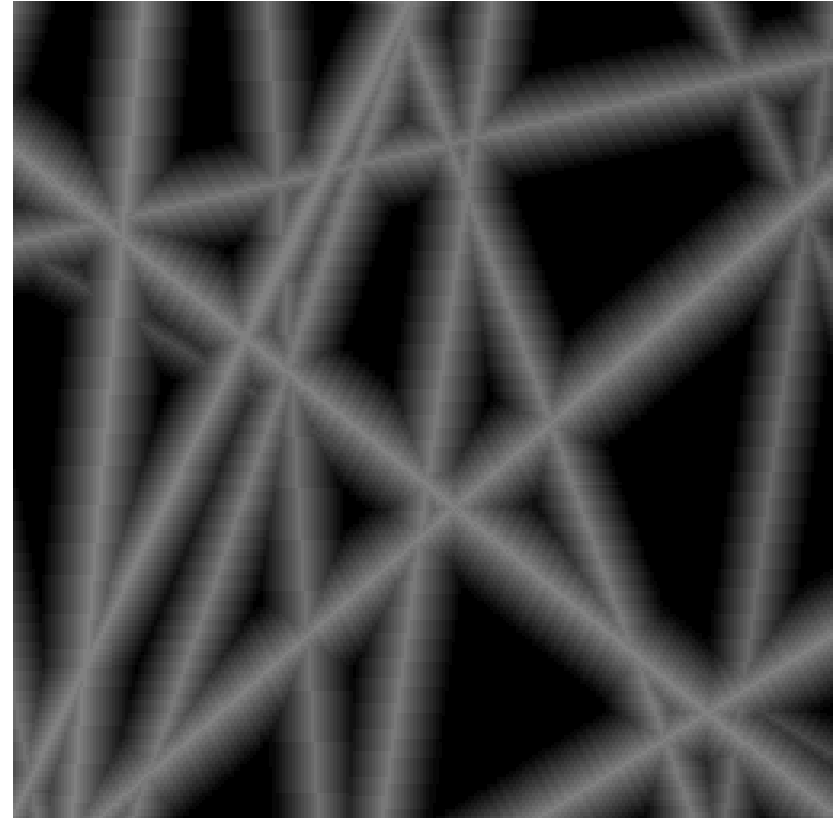




# Fonction Aléatoire Booléenne



Fonction primaire conique

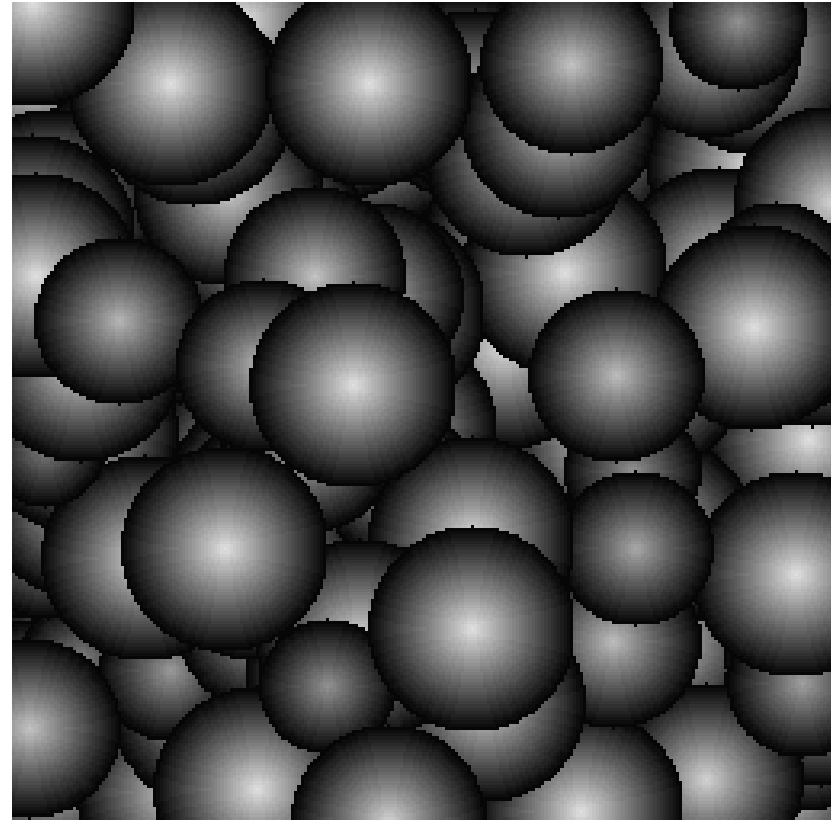
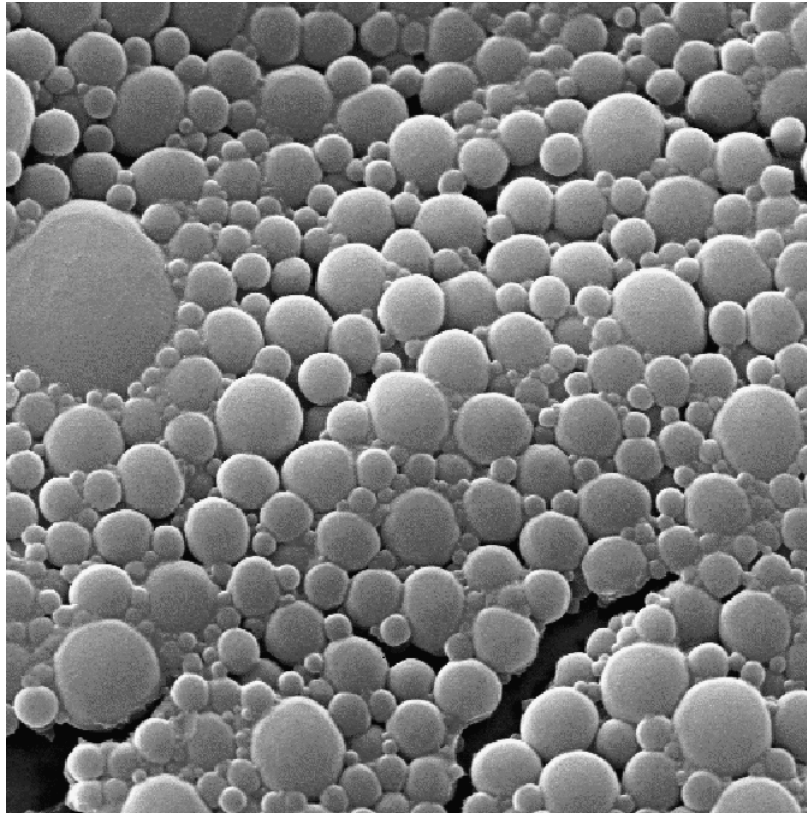


Variété aléatoire Booléenne

Application en Statistique de Rupture



# Feuilles mortes et Poudres



*D. Jeulin, CALGON  $L = 15.5 \mu\text{m}$*



Centre de Morphologie Mathématique  
CFMR, Paris, 13-03-2008

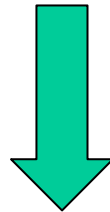
Dominique Jeulin

# Micro-Macro: Changement d'échelle (homogénéisation, rupture)



# Homogénéisation

- Milieu hétérogène (composite, milieu poreux, polycristal métallique, roches, milieu biologique, surfaces rugueuses...)



- Milieu homogène équivalent?
- Propriétés « effectives »



# Exemples de problèmes d'homogénéisation

21

- Déterminer la conductivité thermique équivalente d'un milieu biphase
- Composition des perméabilités d'un milieu poreux
- Modules élastiques d'un milieu hétérogène
- Propagation d'ondes en milieu hétérogène (électromagnétiques, sismiques,...)
- Propriétés optiques d'une surface rugueuse



## Exemples de Propriétés Physiques

Problème			propriété
Conduction thermique	Flux de chaleur	Gradient de température	Conductivité thermique
Electrostatique	Déplacement électrique	Champ électrique	Permittivité diélectrique
Elasticité	contrainte	déformation	Modules élastiques
Ecoulement en poreux	vitesse	Gradient de pression	Perméabilité



# Milieu Homogène et Hétérogène

- Milieu continu dans un domaine  $D$
- En chaque point  $x$  du domaine, propriétés physiques  $P(x)$
- Champ  $P(x)$  solution d'un problème mathématique dérivant :
  - *Principe de conservation (EDP)*
  - *Conditions aux limites sur frontières de  $D$*
  - *Lois de comportement reliant des variables*



# Homogénéisation

- **Bornes** des propriétés macroscopiques (ordre 3: multiphasés et fonctions aléatoires)
- **Microstructures aléatoires optimales**
- **Propagation d'ondes** en milieu aléatoire (électromagnétique, *élastique*)
- ***Définition probabiliste du VER*** (application à la permittivité diélectrique de nanocomposites, et aux modules élastiques de composites)





# Rupture

- Prévoir la rupture d'une pièce sous un chargement donné
- Aspect probabiliste:  $P\{\text{rupture}\}$  (population de défauts) **FIABILITE**
- Prévoir les effets d'échelle (passage de l'éprouvette à la pièce ou à l'ouvrage d'art...)
- Exemple: Weibull (cas particulier de Fonction Booléenne)



# Modèles Probabilistes de Rupture

- Calcul théorique de  $P\{\text{rupture}\}$
- Critères: maillon le plus faible, endommagement, arrêt de fissure
- Couplage Structure-Eléments Finis: VES
- Modèles probabilistes d'endommagement



# Matériaux Numériques



Centre de Morphologie Mathématique  
CFMR, Paris, 13-03-2008

Dominique Jeulin

# Matériaux Numériques

- Entrée d'images 3D
  - Images réelles (microscopie confocale, microtomographie)
  - Simulations à partir de modèles probabilistes
- Utilisation d'un code de calcul (Eléments Finis, solveur numérique d'EDP)
- Homogénéisation
- VER (Volume Élémentaire Représentatif) ?



# Homogénéisation

- Simulations de structures aléatoires couplées à un code de calcul de comportement mécanique par **éléments finis** (logiciel Zébulon du Centre des Matériaux, Micromorph (CMM))
- **Codes de calcul 3D** à base d'itérations de FFT, de traitement d'images, ou de gaz sur réseau: homogénéisation en physique, mécanique, optique et hydrodynamique des milieux hétérogènes



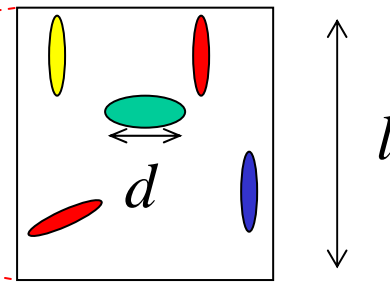
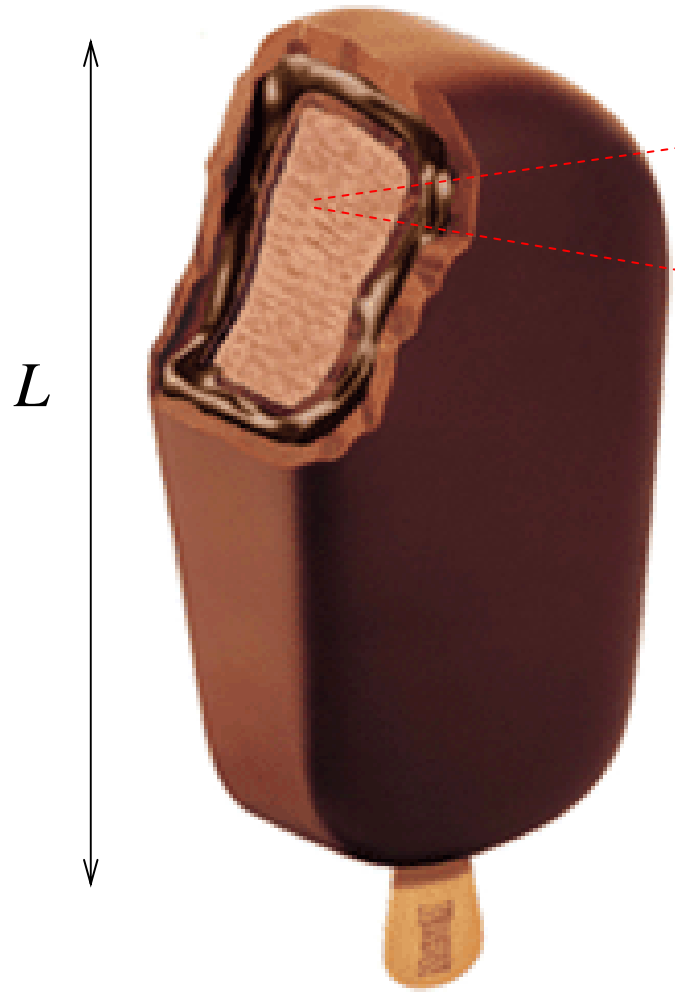
# Comportement Mécanique de la Crème<sup>30</sup> Glacée (Unilever)

- *Thèse de T. Kanit, 2003*
- *Collaboration avec S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury (Centre des Matériaux P.M. Fourt, ENSMP, Evry)*



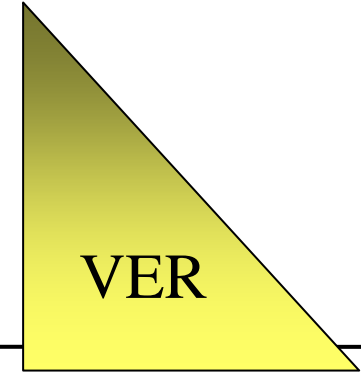
# Comportement Mécanique de la Crème Glacée (Unilever)

Trois échelles d'observation

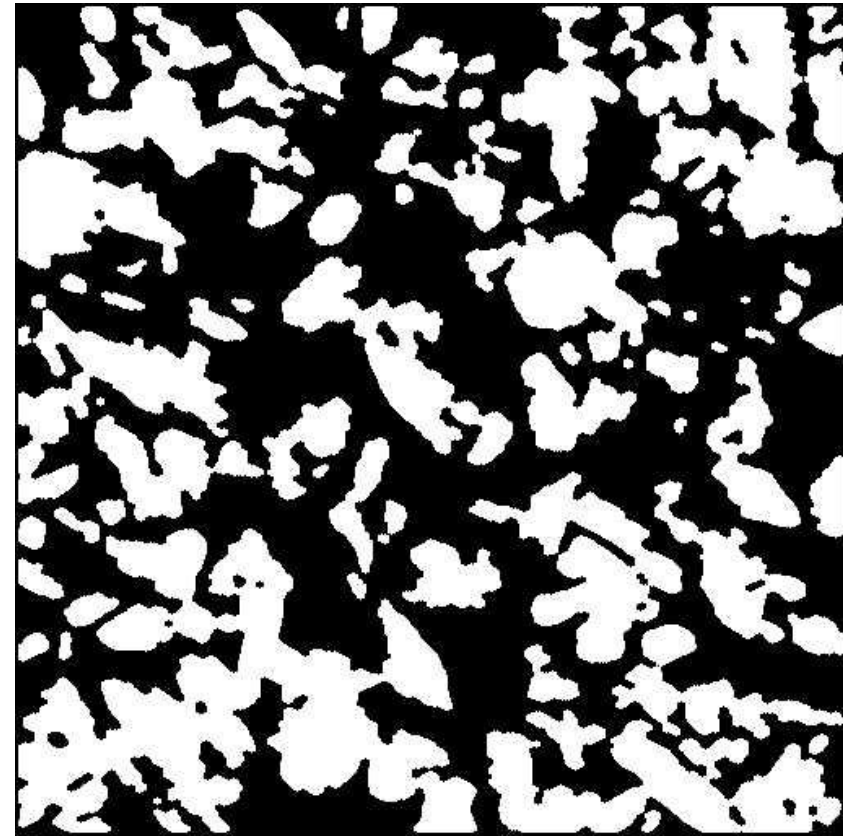
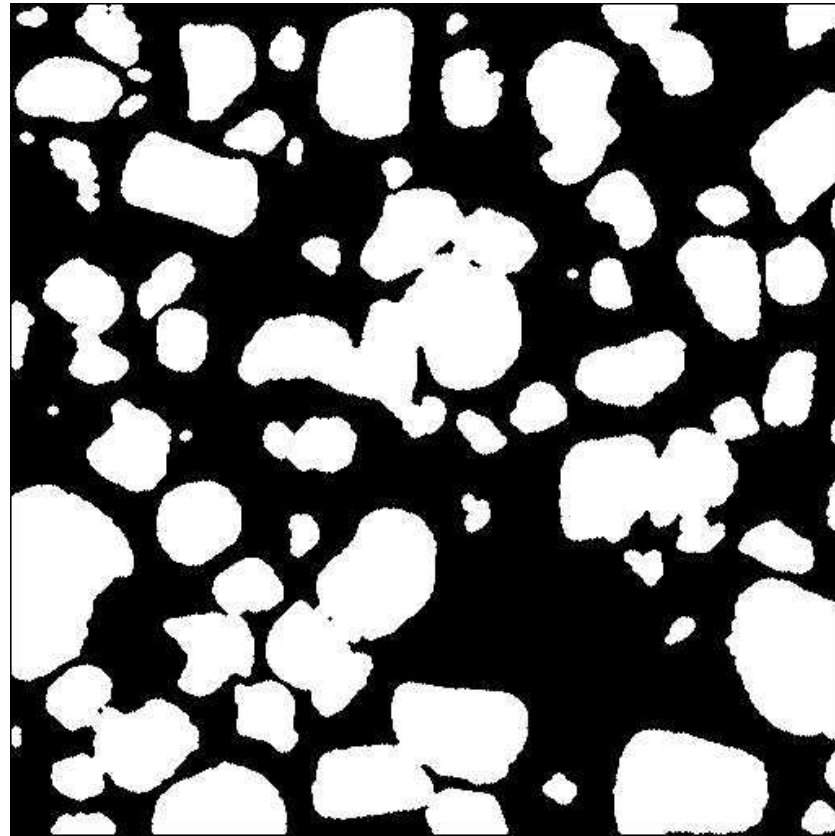


$$d \ll l \ll L$$

Relations Goût  
Propriétés  
Elastiques



# Morphologie et propriétés effectives 32



100  $\mu\text{m}$

**Microstructure grossière**

**Microstructure fine**



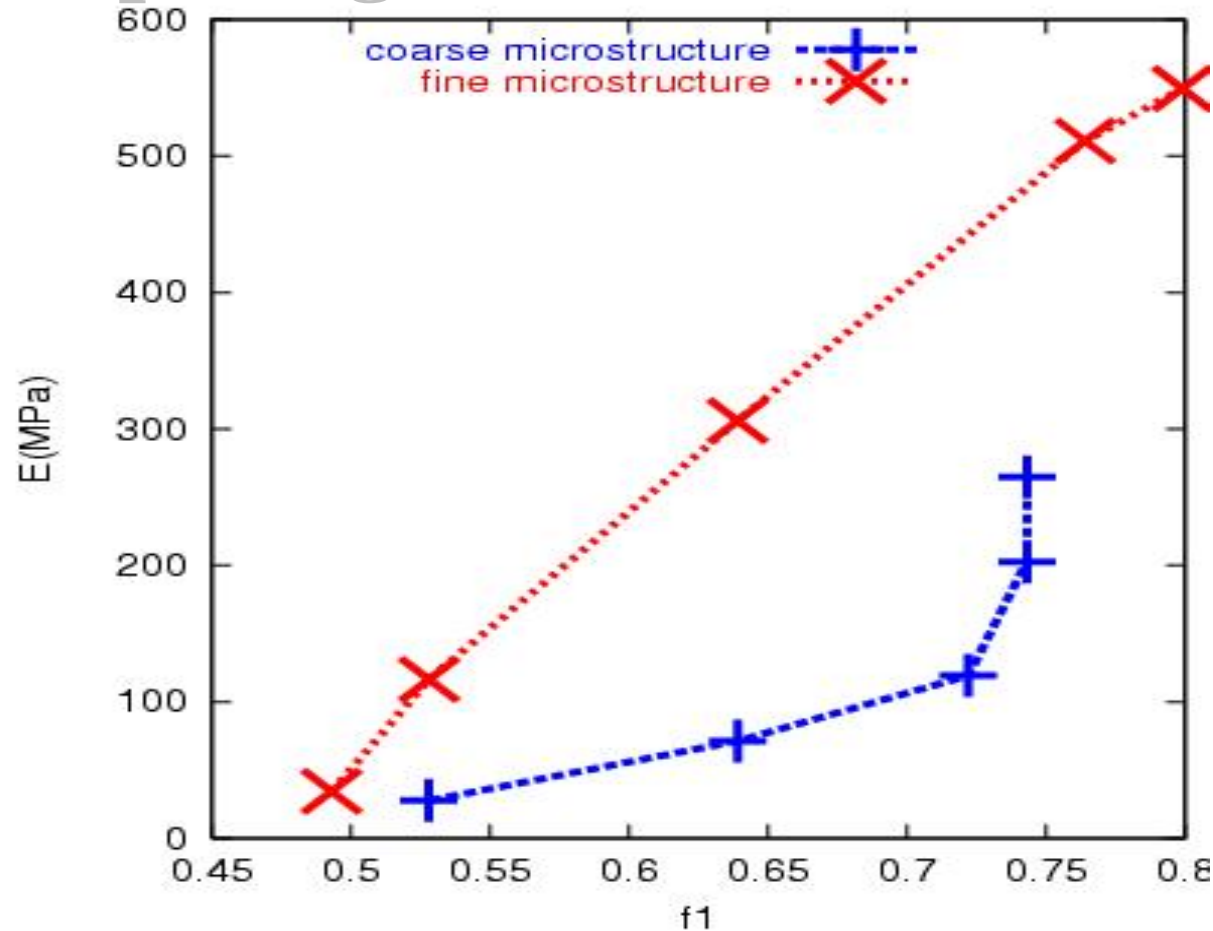
Centre de Morphologie Mathématique  
CFMR, Paris, 13-03-2008

Dominique Jeulin



# Morphologie et module d'Young

33



Mesures (test de flexion 4-point)

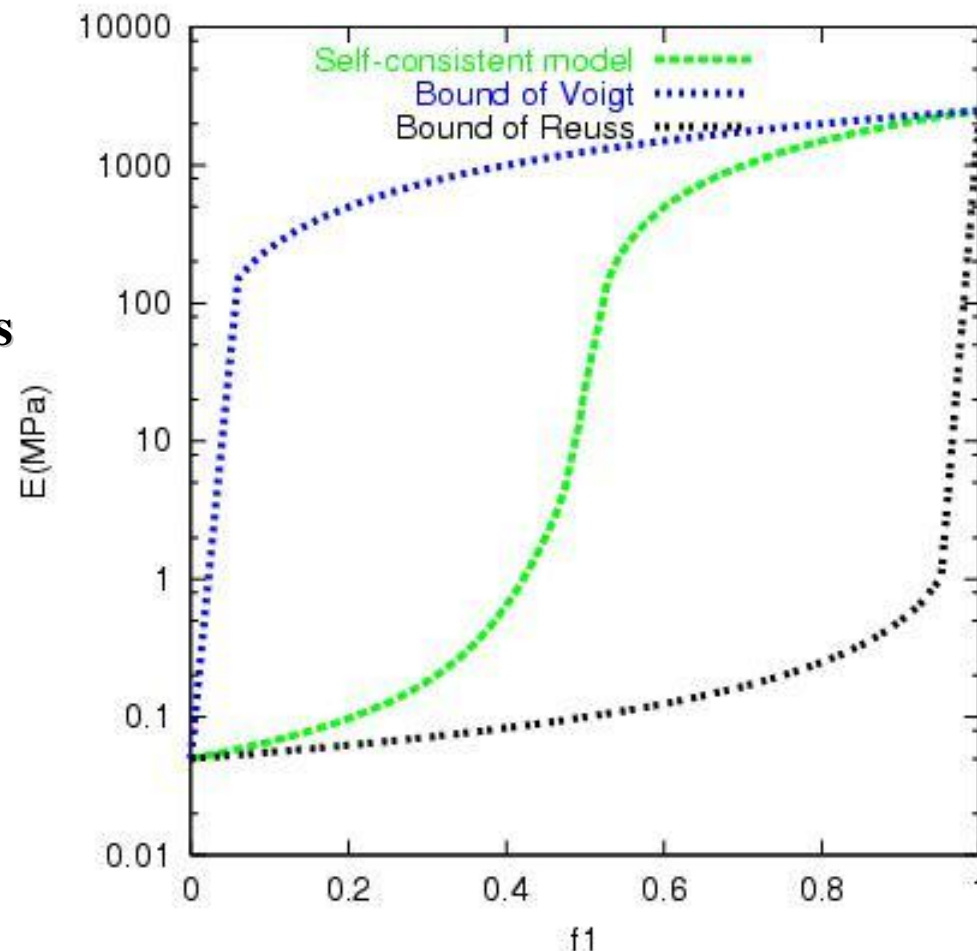
Comment prédire le module d'Young' pour différentes microstructures ?



# Modèles analytiques: bornes et estimations<sup>34</sup>

\* **Bornes** : très éloignées

\* **Estimation** : le modèle Autocoherent ne prend pas en compte la morphologie réelle



**Approche non opératoire pour des milieux avec fort contraste**



# Principe de la Théorie de l'Homogénéisation

- Milieux biphasés hétérogènes, de tenseurs élastiques  $C_1$  et  $C_2$
- Milieu Homogène équivalent, de tenseur élastique macroscopique  $C^{eff}$

• On a:

• Avec les moyennes spatiales  $\Sigma = C^{eff} E$

• Où  $\tilde{\Sigma} = \langle \tilde{\sigma} \rangle$   $\tilde{E} = \langle \tilde{\varepsilon} \rangle$

$$\langle P \rangle = \frac{1}{V} \int_V P(x) dx$$

$\tilde{\sigma}$  et  $\tilde{\varepsilon}$  Sont les tenseurs locaux de contrainte et de déformation



# Principe de la Théorie de l'Homogénéisation

- Milieu biphasé hétérogène, de tenseurs élastiques  $C_1$  et  $C_2$
- Energie élastique moyenne (lemme de Hill-Mandel) d'un échantillon  $V$  soumis à l'une des conditions aux limites:
  - **KUBC** : cinématiques (déformation uniforme aux frontières)
  - **SUBC** : statiques (contrainte uniforme aux frontières)
  - **PERIODIQUE** : conditions aux limites périodiques

$$\langle \underset{\sim}{\sigma} : \underset{\sim}{\varepsilon} \rangle = \langle \underset{\sim}{\varepsilon} : \underset{\sim}{C} : \underset{\sim}{\varepsilon} \rangle = \Sigma : E = \langle \underset{\sim}{\varepsilon} \rangle \underset{\sim}{C}^{eff} \langle \underset{\sim}{\varepsilon} \rangle$$

$\underset{\sim}{\sigma}$  et  $\underset{\sim}{\varepsilon}$  non corrélées



# Volume Élémentaire

## Représentatif



Centre de Morphologie Mathématique  
CFMR, Paris, 13-03-2008

Dominique Jeulin

## VER et Portée Intégrale

- $P(x)$ : propriété locale aléatoire (fonction indicatrice, module d'Young, ...) dans le domaine  $V$ .
- Variance locale de  $P$ :  $D^2[P(x)]$
- Valeur moyenne de  $P$  dans  $V$ :  $\langle P \rangle = \frac{1}{V} \int_V P(x) dx$
- Variance de la moyenne:  $D^2[\langle P \rangle] = D^2[P(x)] \frac{A_3}{V}$
- $A_3$  est la Portée Intégrale de  $P$  (donnant la taille d'un VER pour  $P$ )
- Si  $A_3 \ll V$ ,  $V$  peut être décomposé en  $N = V/A_3$  sous domaines de propriétés non corrélées  $P_i$



## Portée intégrale et précision statistique de la moyenne $\Rightarrow RVE(\varepsilon)$

- Moyenne de  $\langle P \rangle$  dans l'intervalle de confiance

$$\langle P \rangle \pm 2 D[\langle P \rangle]$$

- Précision Relative

$$\varepsilon = \frac{2D[\langle P \rangle]}{\langle P \rangle}$$

- En fonction de la Portée Intégrale

$$\varepsilon = \frac{2D[P(x)] \sqrt{\frac{A_3}{V}}}{\langle P \rangle}$$



# Portée intégrale et Covariance

- Fluctuations des valeurs moyennes  $\langle P \rangle$  de  $P(x)$  (FA stationnaire) dans le domaine  $V$ , en fonction de la covariance centrée  $\bar{W}_2(h)$
- $$\bar{W}_2(h) = E\{ (P(x+h) - E(P))(P(x) - E(P)) \}$$

$$D_P^2(V) = \frac{1}{V^2} \int_V \int_V \bar{W}_2(x-y) dx dy$$





# Portée intégrale et Covariance

- Pour de grands échantillons ( $V \gg A_3$ ), où  $A_3$  est la portée intégrale, formule asymptotique pour la variance:

$$D_P^2(V) = D_P^2 \frac{A_3}{V}$$

$$\text{avec } A_3 = \frac{1}{D_P^2} \int_{R^3} \overline{W}_2(h) dh$$

où  $D_P^2$  est la variance ponctuelle de  $P(x)$



# Covariance ensembliste

- Covariance  $C(h)$  d'un ensemble aléatoire  $A$

$$C(x, x + h) = P\{x \in A, x + h \in A\}$$

- Pour un ensemble aléatoire stationnaire,

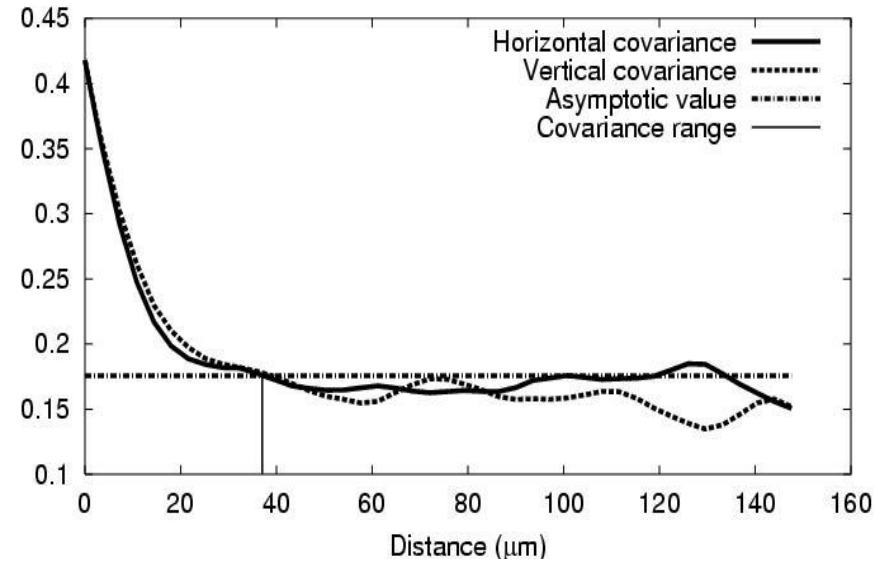
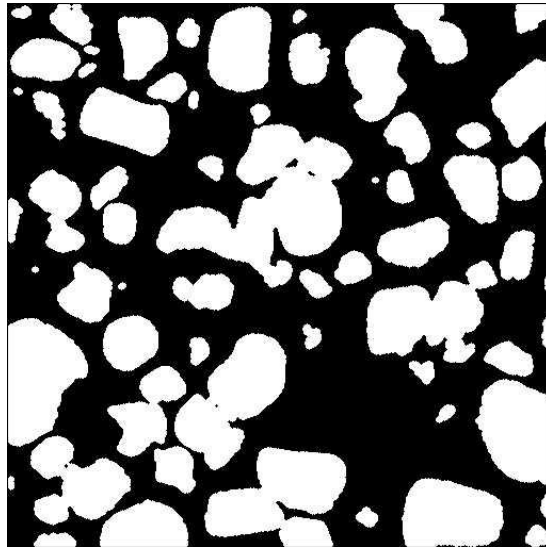
$$C(x, x+h) = C(h)$$

- Pour un ensemble ergodique,  $C(h)$  est estimé par la fraction volumique de  $A \cap A_{-h}$

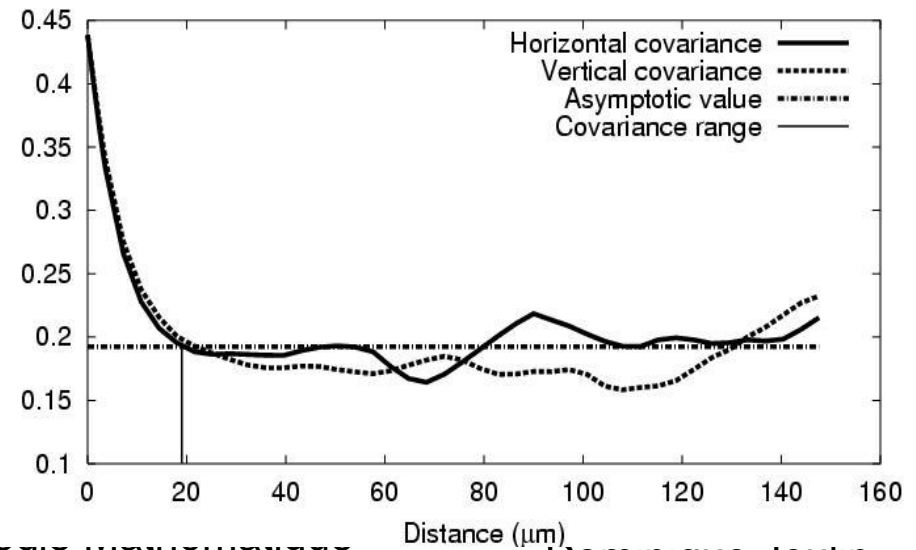
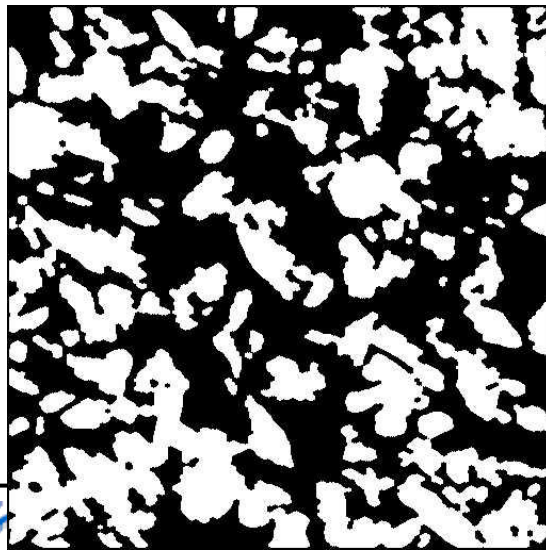


# Microstructure and Covariance

sans  
AFP



avec  
AFP



# Covariance ensembliste et Covariance des champs

44

- Liens entre les deux?
- Généralement pas de lien direct!!
- La Covariance des champs dépend de tous les moments « ensemblistes » à  $n$  points d'appui...



# Détermination de la portée intégrale et du RVE

45

- Partir de réalisations de la microstructure (images ou simulations)
- Utiliser les C.L. appropriées (Périodiques,...) pour estimer les propriétés effectives de chaque réalisation
- Estimer la moyenne et la variance des propriétés effectives en fonction du volume des échantillons
- Estimer  $A_3$ , le RVE et le nombre de champs à simuler en fonction de la précision souhaitée



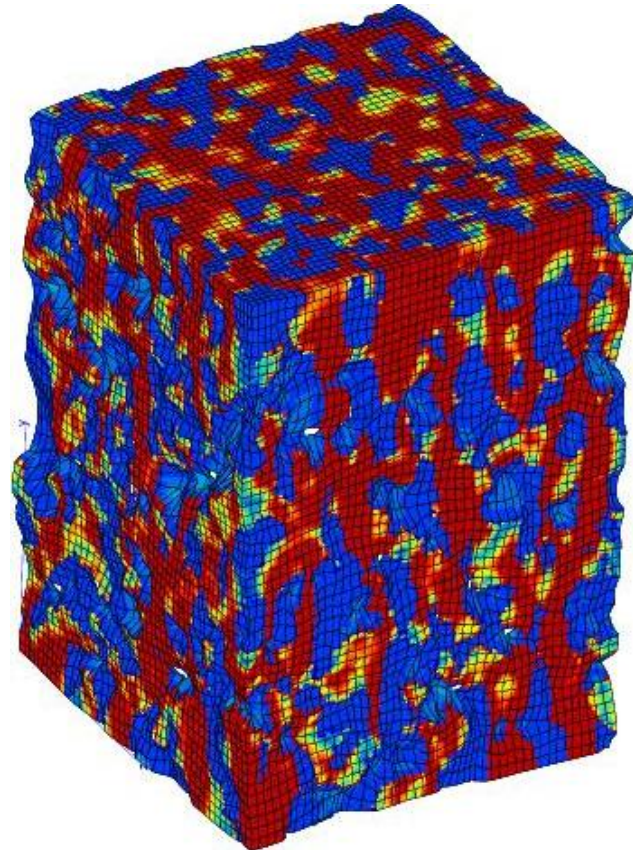
## Modules Elastiques et Conductivité Thermique de la Mosaïque de Voronoï 3D

- Partition de Voronoï de l'espace 3D: zones d'influence de points aléatoires de Poisson
- Coloration aléatoire indépendante de chaque polyèdre de Voronoï: mosaïque de Poisson (texture biphasee)
- Calculs par Eléments Finis de réalisations de mosaïque de Voronoï dans un volume fini  $V$

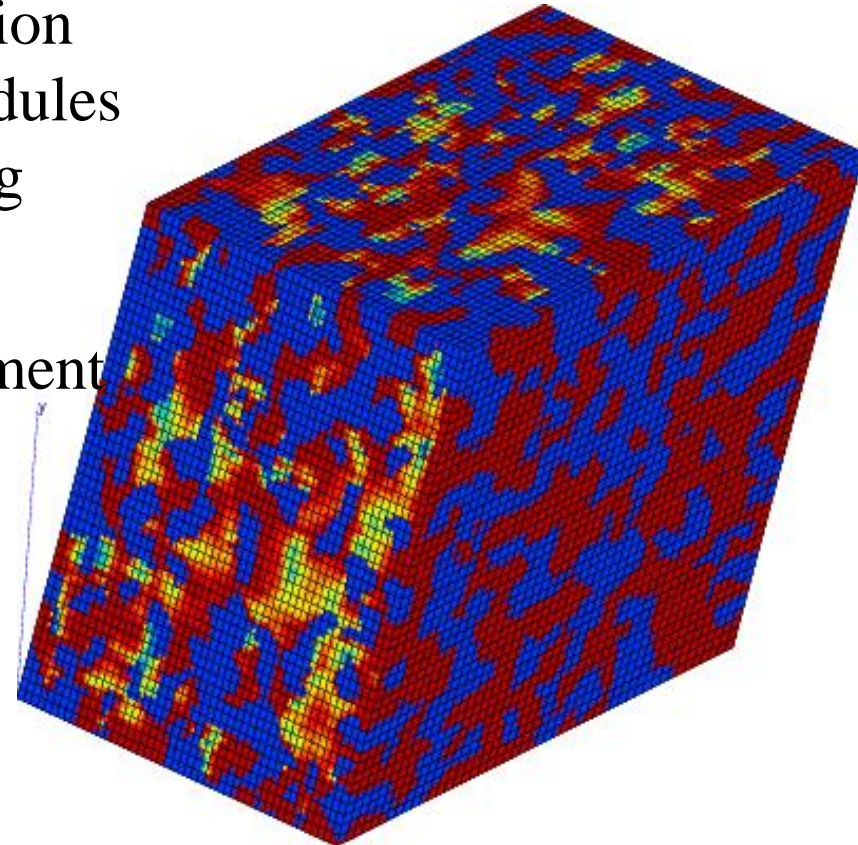


# Calcul sur des microstructures de Voronoï

47



Estimation  
des Modules  
d'Young  
et de  
cisaillement



55% phase rouge, contraste = 100 pour le module d'Young  
10000 grains; calcul parallèle (cluster de 32 PC)  
(carte de contrainte de Von-Mises)



## Résultats pour la mosaïque de Voronoi

### Fluctuations de la fraction volumique: nombre de grains pour une précision voulue

	$\mathcal{E}_{relative} = 1\%$	$\mathcal{E}_{relative} = 5\%$
Fraction Volumique	Nombre Minimal	Nombre Minimal
50%	47000 grains	1880 grains
70%	20000 grains	800 grains
90%	5240 grains	210 grains



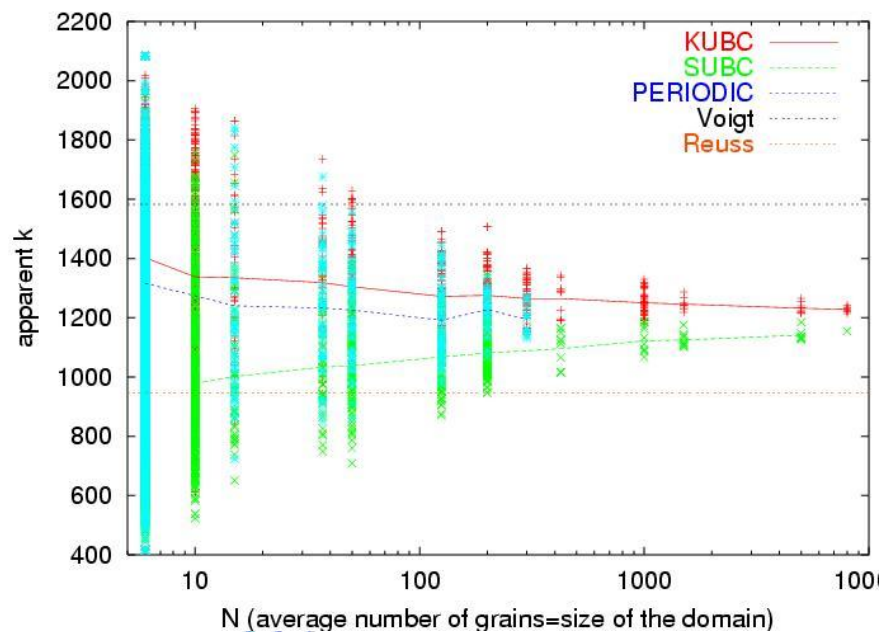


# Résultats pour la mosaïque de Voronoi<sup>49</sup>

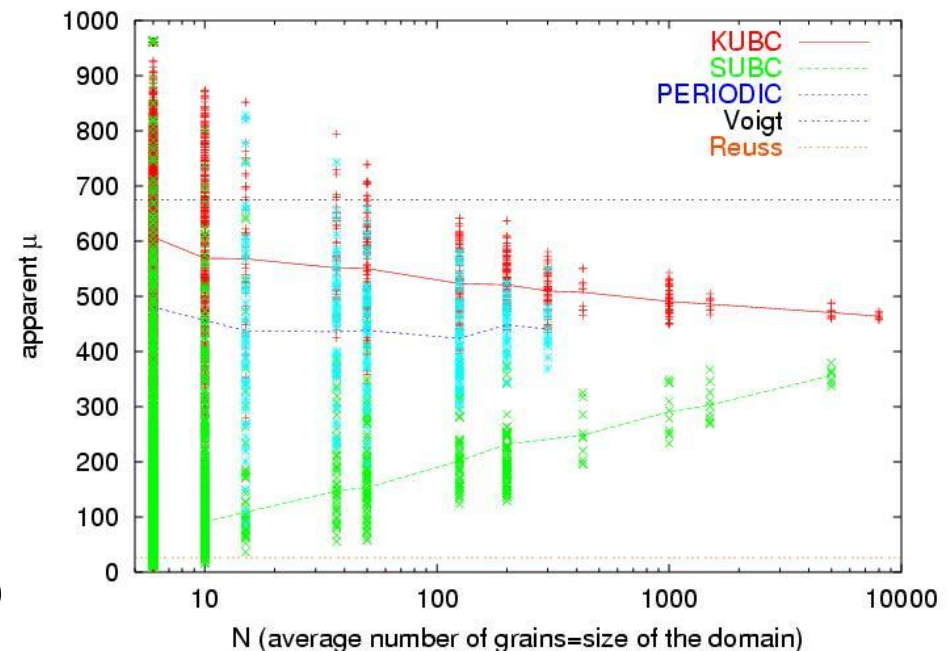
## Fluctuations de modules élastiques

- fraction volumique = 70% de phase dure
- contraste de module d'Young = 100
- KUBC : kinematic (strain) C.L.
- SUBC : static (stress) C.L.
- PERIODIC : C.L. périodiques
- Voigt : borne de Voigt; Reuss : borne de Reuss

### Module de compressibilité



### module de cisaillement



# Résultats pour la mosaïque de Voronoï

## Nombre Minimal de réalisations pour des conditions aux limites périodiques

Exemple: VER pour modules sans biais = 125 grains

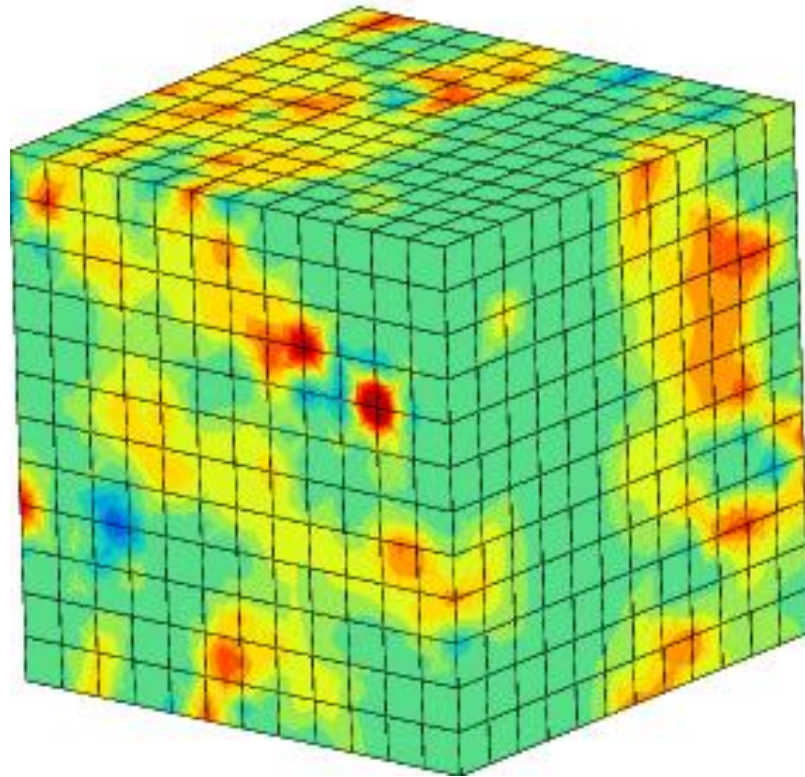
	$\mathcal{E}_{relative} = 1\%$	$\mathcal{E}_{relative} = 5\%$
	nombre de VER	nombre de VER
Module de compressibilité	386	16
Module de cisaillement	1320	53



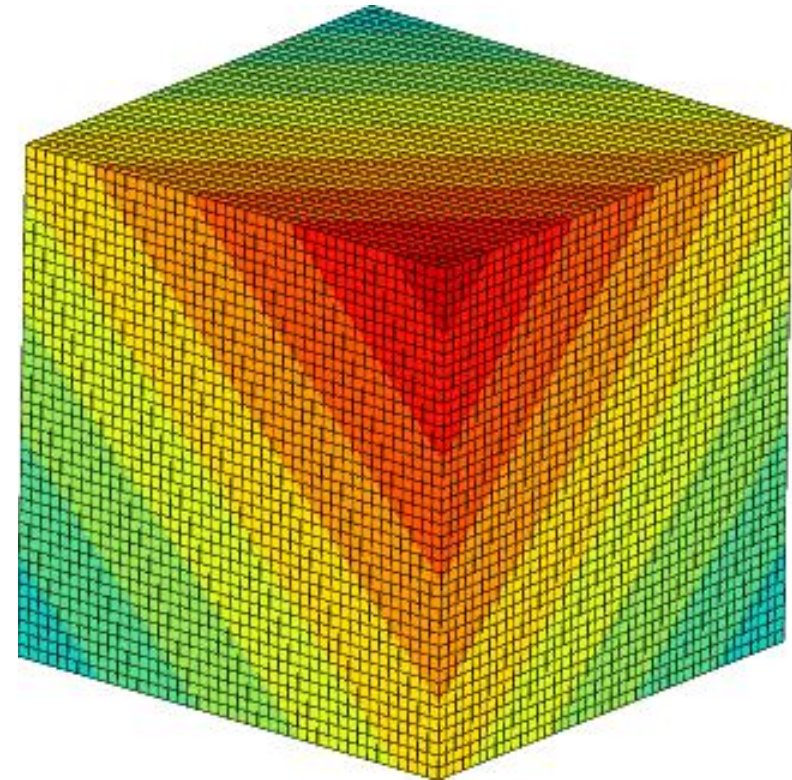
# Conductivité Thermique de la mosaïque de Voronoï<sup>51</sup>

70% glace, contraste = 100

Calcul de la conductivité thermique dans 3 directions



flux dans la direction (z)  
c.l. périodiques (8281 d.o.f.)



Carte de température pour c.l.:  
gradient thermique uniforme  
(312481 dl sur 20 pc)

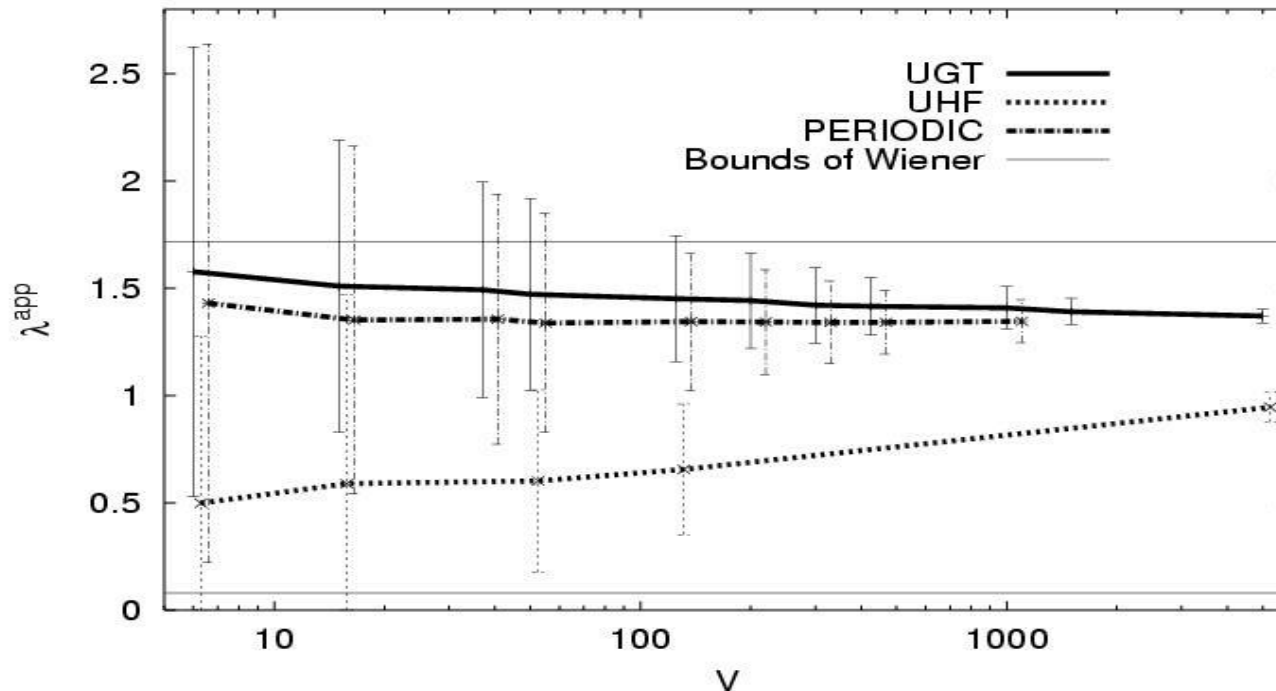


# Résultats pour la mosaïque de Voronoï

52

## Fluctuations de la conductivité thermique

- fraction volumique = 70% de phase dure (glace)
- Contraste de conductivité thermique = 100
- UGT : gradient de température uniforme en frontière
- UHF : flux thermique uniforme en frontière
- PERIODIC : conditions aux limites périodiques



# Résultats pour la mosaïque de Voronoï

## Nombre Minimal de réalisations (C.L. périodiques)

Exemple: VER pour volume non biaisé = 125 grains

	$\mathcal{E}_{relative} = 1\%$	$\mathcal{E}_{relative} = 5\%$
	Nombre de VER	Nombre de VER
conductivité thermique	765	30



# Portée intégrale (fraction volumique $P$ )

54

	0.5	1.178
$P =$	0.7	1.111
	0.9	1.177

**Gilbert (1962): 1.179**



# Portée intégrale (modules élastiques)

55

$$E_1 / E_2 = 100$$

K (P = 0.7)	KUBC	2.088
$\mu$ (P = 0.7)	KUBC	1.863
$\mu$ (P = 0.5)	Périodique	1.637



# Portée intégrale (conductivité thermique)

56

$$P = 0.7; \lambda_1 / \lambda_2 = 100$$

	UGT	2.335
$\lambda$	UHF	2.036
	Périodique	2.619





# Conclusion

- Outil statistique pour calculer la précision de l'estimation des propriétés effectives, basé sur la portée intégrale  $A_3$
- $A_3$  et donc le VER, dépend des CL (périodiques, homogènes), de la microstructure (géométrie), du contraste, et des propriétés homogénéisées (modules élastiques, conductivité thermique, etc...)
- Même démarche pour propriétés non linéaires (additivité des champs)
- Travail futur: déterminer directement la portée intégrale à partir de la microstructure?



# Conclusion Générale

- Grande diversité de microstructures et de problèmes physiques
- Domaines d'application très variés
- Outils, Modèles et Simulations (et logiciels)
- Nécessité de mesures physiques à l'échelle micro
- Nombreux problèmes méthodologiques et théoriques à résoudre



# Pour en savoir plus

- Deux E.S. à l'Ecole des Mines de Paris
- « *Physics and Mechanics of Random Media* » (25-28 Mars 2008)
- « *Models of Random Structures* », ENSMP - ATHENS (Novembre 2008)
- Réunion *Mecamat* « Approches probabilistes en mécanique » (ENSMP, Fontainebleau, 16-17 Avril 2008)

