Reconstructiontochastiquealgorithmetecusitmulé

(RS), avantage principal de l'algorithme du recuit simulé aléatoire, est de permettre de construire une solution « optimale » en minimisant une fonction d'énergie, appelée aussi fonction du coût ou fonction d'objectif. Il a l'inconvénient d'une convergence lente.

La structure tridimensionnelle est constituée d'un réseau ou grille de sites, appelés aussi nœuds ou *voxels*, à chacun desquels est attribué une valeur qui représente l'état de ce site.

Dans les paragraphes suivantes nous définissons les concepts élémentaires qui servent à établir les informations morphologiques, notamment les différents modes de corrélation *n*points et la fonction du chemin linéaire. Un paragraphe est consacré à la description de la procédure de minimisation par le schéma du recuit simulé et l'explication de différentes étapes de l'algorithme de la reconstruction. Sont ensuite exposés des exemples de reconstruction de structures de l'ordre à longue et à courte distance. La conclusion donne un aperçu des avantages et des inconvénients de cette méthode d'optimisation ainsi que sur les perspectives d'emploi.

II.3. Concepts morphologiques élémentaires

Dans la littérature on trouve plusieurs types de descripteurs statistiques qui peuvent être choisis comme fonction de référence [1], toutefois le travail présenté ci-après se limite à l'usage de la fonction de corrélation 2-points et à la fonction du chemin linéaire. Ces deux sources d'informations morphologiques sont assez simples d'utilisation et elles contiennent suffisamment d'informations sur la structure pour l'usage que nous envisageons.

II.3.1. Fonction de corrélation 1-point

Dans un milieu binaire bi-phasique d'une taille totale V_{tot} dans lequel la phase **A** occupe une fraction ϕ_A de ce volume ainsi que la phase **B** occupe la fraction complémentaire ϕ_B de façon que $\phi_A + \phi_B = 1$, la fonction de corrélation 1-point (connue aussi comme la fonction de phase ou la fonction indicateur) est définie comme :

$$Z(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \vec{r} \in V_{ref} \\ 0, & \vec{r} \notin V_{ref} \end{cases}$$
(Eq. II-2)

ce qui indique si le point (qui est un vecteur) \vec{r} appartient ou non à la phase de référence dont

la taille est $V_{ref} = \phi_{ref} V_{tot}$. La valeur de cette fonction donne la fraction volumique de la phase :

$$S_1^{(i)} = \langle Z^{(i)}(\vec{r}) \rangle = \phi_i$$
 (Eq. II-3)

ce qui représente la probabilité de trouver un point, choisi aléatoirement, en phase *i*. Cette fonction donne la valeur de la porosité ϕ quand l'une des phases est gazeuse. Cette fonction est d'application simple. Il suffit, pour l'estimer dans un milieu binaire, de compter les *pixels* (*voxels* en 3D) qui appartiennent à une phase de référence et puis diviser ce nombre par le nombre total de pixels du domaine d'intérêt.

II.3.2. Fonction de corrélation 2-points

Dans une structure quelconque qui se compose de deux phases, la fonction de corrélation 2-points $S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est définie comme la probabilité de trouver les deux points \vec{r}_1, \vec{r}_2 dans la même phase :

$$S_{2}^{(i)}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2}) = \left\langle Z^{(i)}(\vec{r}_{1}).Z^{(i)}(\vec{r}_{2}) \right\rangle$$
(Eq. II-4)

Cette fonction dépend seulement du vecteur $\vec{R} = \vec{r_1} - \vec{r_2}$ dans un milieu isotrope:

$$S_{2}^{(i)}(\vec{R}) = \left\langle Z^{(i)}(\vec{r_{1}}) \cdot Z^{(i)}(\vec{r_{1}} + \vec{R}) \right\rangle$$
(Eq. II-5)

La distance \vec{R} se mesure en *pixels* ce qui signifie que cette distance a une valeur entière.

Pour une phase donnée, deux propriétés importantes de cette fonction sont:

- 1. $S_2(0) = \phi$,
- 2. $\lim S_2(R)_{R\to\infty} = \phi^2$, en l'absence d'ordre à longue distance.

La fonction de corrélation de la deuxième phase est reliée à celle de la première phase par la relation :

$$S_{2}^{(2)}(R) = S_{2}^{(1)}(R) - 2\phi_{1} + 1$$
 (Eq. II-6)

La fonction de corrélation microstructurale 2-points est un descripteur statistique efficace de caractérisation d'une structure hétérogène. Cette fonction contient les informations quantitatives relatives aux propriétés microstructurales comme les fractions volumiques des phases constituantes, la connectivité des phases et l'anisotropie morphologique. Elle convient bien pour résumer des microstructures réalistes. La Figure II–7 donne un exemple de la fonction de corrélation 2-points.

Pour une image binaire bidimensionnelle, Jiao et al. [35] ont écrit la fonction de corrélation 2-point sous forme de l'équation :

$$S(x, y) = \sum_{i=1}^{M} \sum_{j=1}^{N} \frac{I(i, j) * I(i + x, j + y)}{M * N}$$
(Eq. II-7)

d'où M * N représente la taille de l'image, I(i, j) est un entier qui prend une des deux valeurs : soit 0 soit 1.



Figure II–7 : (a) Image binaire d'un grès (sandstone) (les pores sont en blanc) de 300x300 *pixels* (le pixel fait 5µm), (b) la fonction de corrélation 2-points. (référence [36].)

La corrélation 2-points peut aussi être décrite en utilisant la fonction d'auto-corrélation 2-points qui est la version normalisée de la fonction de corrélation 2-points (voir Figure II– 8) :

$$R_{2}(\vec{R}) = \frac{\left\langle Z(\vec{r_{1}} - \phi) . Z(\vec{r_{1}} + \vec{R} - \phi) \right\rangle}{\phi - \phi^{2}}$$
(Eq. II-8)



Figure II–8 : (a) Image d'un agrégat de billes de verres (les pores en noir) de 760x570 *pixels*. (2.1x2.1 μm²) (b) La fonction d'auto-corrélation extraite de l'image (a). (référence [31].)

Les propriétés de l'auto-corrélation 2-points $R_2(\vec{R})$ sont :

- 1. $R_2(0) = 1$,
- 2. $\lim R_2(\vec{R})_{\vec{R}\to\infty} = 0$, en l'absence d'ordre à longue distance.

D'autres fonctions de corrélation n-points peuvent être définies de façon à ce que les n points appartiennent toujours à la même phase étudiée :

$$S_{2}^{(i)}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2},...,\vec{r}_{n}) = \left\langle Z^{(i)}(\vec{r}_{1}).Z^{(i)}(\vec{r}_{2})....Z^{(i)}(\vec{r}_{n}) \right\rangle$$
(Eq. II-9)

En pratique, l'estimation de la fonction de corrélation n-points (n > 2) est numériquement difficile et couteuse en temps de calcul.

Notons que la fonction de corrélation 2-points peut être obtenue expérimentalement par la dispersion de rayons-X aux petits angles [37].

Pour l'étude d'un milieu anisotrope, la fonction de corrélation 2-points peut être construite par l'analyse mutuelle de différentes coupes prises selon les trois axes principales [38, 39].

II.3.3. Surface volumique

La surface volumique *s* d'un milieu bi-phasique peut être définie comme l'aire de l'interface *phase1-phase2* divisée par le volume total unitaire du milieu (ce milieu étant supposé représenté une masse de matériau). L'unité de *s* est l'inverse d'une longueur et c'est une mesure caractéristique importante du milieu. En fait, il est montré que la pente de la fonction de corrélation 2-point prend, quand r = 0, peu importe la phase, la valeur de -s/4 dans l'espace tridimensionnelle, et en général :

$$\frac{d}{dr}S_2(r)_{|r=0} = \begin{cases} -s/2 & D=1\\ -s/\pi & D=2\\ -s/4 & D=3 \end{cases}$$
(Eq. II-10)

D étant la dimension de l'espace. Dans un milieu digital de dimension D, Eq. II-8 devient :

$$\frac{d}{dr}S_2(r)_{|r=0} = -s/(2D)$$
(Eq. II-11)

La procédure d'évaluation de la valeur de *s* dans un milieu digital tridimensionnel est la suivante : on compte la surface d'interface de chaque *voxel* appartenant à une phase de référence. Sachant qu'un *voxel* dans l'espace est entouré par 26 *voxels*, comme il est montré dans la Figure II–9.



Figure II–9 : Un *voxel* O dans l'espace digital tridimensionnel est en contact avec 26 *voxels*, par sommet O, par arrêt O et par face O.

II.3.4. Fonction du chemin linéaire

La fonction de corrélation 2-points ne peut pas à elle seule définir complètement un matériau hétérogène bi-phasique. Un autre descripteur morphologique de la structure d'un milieu dispersé est la fonction du chemin linéaire (en anglais, *Lineal-path function*). Dans une structure quelconque qui se compose de deux phases, la fonction de chemin linéaire $L^{(i)}(\vec{r_1}, \vec{r_2})$ est définie comme la probabilité de trouver tous les points d'un vecteur $\vec{R} = \vec{r_1} - \vec{r_2}$ dans la même phase :

$$L^{(i)}(\vec{R}) = P(\vec{r_1}, \vec{r_2})$$
 (Eq. II-12)

$$P(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} 1, & \vec{r} \in \vec{R} \\ 0, & \vec{r} \notin \vec{R} \end{cases}$$
(Eq. II-13)

où, $\vec{R} \in V_{ref}$. Pour une phase donnée, deux propriétés importantes de cette fonction sont :

1.
$$L(0) = S_2(0) = \phi$$

2. $\lim L(\infty) = 0$, dans l'absence de l'ordre à longue distance.

Cette fonction décrit la connectivité locale en 2D du milieu étudié, au moins le long d'un chemin linéaire. Elle reflète certaines informations à longue distance sur le système étudié. Figure II-10 est un exemple de cette fonction.





Pour résumer, la procédure de l'évaluation de la fonction $L_p(R)$ d'une phase est faite pour un *pixel* d'une phase donnée par mesure de la distance en *pixels* entre ce *pixel* et le *pixel* le plus proche contenu dans la phase opposée dans une direction. Il faut balayer la totalité de l'image, compter le nombre des essais dans lesquelles tous les points (*pixels*) de cette ligne se trouvent dans la même phase concernée, et à la fin des opérations diviser ce nombre par le nombre total des essais accomplies (ce nombre correspond à la taille du milieu quand l'on parle d'un domaine périodique).

II.3.5. Fonction de percolation de volume

La percolation traduit le passage d'une information entre deux points d'un système. Dans le cas d'un corps poreux la percolation représente la pénétration des pores entre deux faces du matériau. Ce principe est illustré en Figure II–11.



Figure II-11 : Percolation de la phase solide par les pores (sphères bleues) (référence [40]).

Les pores isolés rencontrés dans le matériau sont présents normalement mais ne contribuent pas à l'écoulement. Ainsi, la fraction de volume des pores à travers lequel le fluide peut percoler est très importante lors de l'étude de l'écoulement car elle montre le degré de connexion de l'espace pores. La fraction de percolation de volume f_P :

$$f_P = \phi \times \phi' \tag{Eq. II-14}$$

 ϕ le volume total des pores et ϕ' le volume des pores en connexion.

II.3.6. Fonction d'amas 2-points

La fonction d'amas 2-points (en anglais : 2-points cluster function) $C^{(i)}(x_1, x_2)$ est définie comme la probabilité de trouver deux points x_1, x_2 choisis aléatoirement, dans le même amas (cluster) d'une phase i. Elle est applicable à une structure tridimensionnelle.

II.3.7. Fonction de distribution de la taille des pores

La fonction de distribution de la taille des pores (en anglais : *size distribution function*) $P(\delta)$ est définie comme la probabilité de trouver un point de la phase de pores à une distance entre δ et $\delta + d\delta$ du point le plus proche de l'interface solide/pore. Cette fonction est différente de la distribution de taille de pore obtenue directement par la technique du porosimètre à mercure. Cette fonction est applicable à l'analyse de la structure résultante de la reconstruction tridimensionnelle [41].

II.4. Recuit simulé pour la reconstruction tridimensionnelle

II.4.1. Procédure d'optimisation

Le problème de reconstruction, ou de construction, est un problème d'optimisation [1]. Dans la suite de l'analyse, on considère un milieu poreux isotrope constitué de deux phases : la phase solide continue et la phase dispersée qui forme des pores. Le but est de reconstruire ce milieu en 3D en utilisant les informations statistiques extraites d'une configuration représentative bidimensionnelle, par exemple une image MEB.

Soit la fonction de référence $S_{2,ref}(\vec{R})$ d'une phase quelconque mesurée à partir de l'image MEB transformée en image binaire, $S_{2,sim}(\vec{R})$ est la même fonction mais ici de la structure générée en 3D. La fonction de l'énergie E [42], appelée aussi la fonction du coût et la fonction objective [36], est définie comme la somme de carré de différences entre la fonction de référence $S_{2,ref}(\vec{R})$ et la fonction estimée dans la structure générée $S_{2,sim}(\vec{R})$:

$$E = \sum_{r=1}^{r=\bar{R}} \left[S_{2,sim}(r) - S_{2,ref}(r) \right]^2$$
(Eq. II-15)

Le but sera donc de minimiser cette fonction E pour avec la structure reconstruite obtenir l'état souhaité et qui est statistiquement semblable à la structure dont on a eu une image bidimensionnelle. Dans le cas où plusieurs fonctions statistiques sont considérées, Eq. II-12 devient :

$$E = \sum_{j=1}^{j=n} \sum_{r=1}^{r=\bar{R}} \left[S_{2,sim,j}(r) - S_{2,ref,j}(r) \right]^2$$
(Eq. II-16)

où, *n* est le nombre de fonctions considérées dans la simulation. La technique d'optimisation adaptée à ce genre de problème est la méthode du recuit simulé [43, 44]. Elle est utilisée pour l'optimisation de problème de grande échelle où un minimum global (*mimimum minimorum*) s'est caché parmi plusieurs minima locaux. L'équation générale de l'énergie pour un système multiphasique anisotrope s'écrit :

$$E = \sum_{i} \sum_{j} \sum_{k} \alpha_{j,k} \left[f_s^{(j,k)} (r^n) - f_0^{(j,k)} (r^n) \right]^2$$
(Eq. II-17)

 α est un facteur de masse qui représente l'importance relative de chaque fonction individuelle sur l'énergie totale [18]. La sommation *i* est multidimensionnelle sur toutes les configurations *n*. La sommation *j* concerne les différentes phases dans un système *p*-phasique, et *k* est relatif à l'anisotropie.

Le concept de chercher de l'état d'énergie minimum par le schéma du recuit simulé est basé sur l'analogie avec la physique du recuit, procédé utilisée par les métallurgistes [45, 46]. Lorsqu'un système est chauffé jusqu'une température élevée puis est laissé refroidir lentement, il arrive à un état d'équilibre. Pour une température donnée T, la probabilité d'être dans un état d'énergie E est donnée par la distribution de Boltzmann [47] :

$$P(X) = \frac{1}{Z_T} \exp\left(-\frac{E(X)}{K_B T}\right)$$
(Eq. II-18)

 $X \in \Omega$ (X est une configuration du système physique), E est une fonction d'énergie définie sur Ω et T est la température. K_B est la constante de Boltzmann. La température du recuit diminue selon un programme prescrit jusque l'obtention de l'énergie du système dans un état très proche de l'état de l'équilibre à un seuil de tolérance préalablement définie. Figure II–12 illustre la procédure du recuit.



Figure II-12 : Principe physique du recuit ; l'idée est d'obtenir un minimum global de l'énergie du système.

Dans notre cas, pour commencer la simulation, une structure 3D, définie par un volume total $V_{tot} = L_X \times L_Y \times L_Z$, est générée aléatoirement et de façon que la phase à reconstruire soit contrôlée par la valeur de fraction volumique de cette phase ϕ . Cette fraction volumique est déterminée directement de l'image binaire de référence en 2D ou même par voie expérimentale sur un échantillon du matériau.

Supposons que la phase des pores soit à reconstruire, à chaque itération ou perturbation du système un *voxel* de la phase des pores est choisi, aléatoirement, librement ou selon un critère de sélection [36], et échangé avec un *voxel* de la phase solide choisi de même manière. Cet échange garanti la conservation de fraction volumique de chaque phase. Du fait de cet échange, un nouveau système est obtenu. Ce dernier système est accepté si la valeur de sa fonction de coût E' diminue : E' < E, sinon le système sera conditionnellement accepté avec probabilité $P(\Delta E)$. Ceci constitue l'algorithme de Metropolis [23] (ou Metropolis-Hastings d'après[43]) :

$$P(\Delta E) = \begin{cases} 1, & \text{si } \Delta E^{(t)} \le 0\\ e^{-\Delta E^{(t)}/T^{(t)}}, & \text{si } \Delta E^{(t)} > 0 \end{cases}$$
(Eq. II-19)

où, $\Delta E = E' - E$, et T est un variable appelé la « température » du recuit.

II.4.2. Algorithme général de la reconstruction par la méthode du recuit simulé

La Figure II-13 illustre l'algorithme suivi dans ce travail. La mise en place de cet algorithme de calcul est relativement simple et, dans la suite, les différentes étapes seront détaillées.





II.4.2.1. Structure tridimensionnelle initiale

La taille du domaine à reconstruire est limitée par la capacité de la machine du calcul. Néanmoins, il n'est pas utile de choisir une grande taille qui serait pénalisée par le temps du calcul. Pour un matériau donné, un domaine de taille 122³ est suffisant pour remonter à l'espace 3D et, en comparant avec un domaine de taille 167³ par exemple, on arrive aux mêmes résultats en économisant 14 fois le temps du calcul.

L'initialisation du domaine se fait après avoir choisi une phase de référence dont ϕ est connue, par la génération aléatoirement de $\phi \times V_{tot}$ voxels qui vont représenter cette phase. Le reste des voxels du domaine sera attribué à la deuxième phase.

Une autre possibilité est aussi de définir l'image de référence dans le plan Z = 0 et de garder les *voxels* intangibles pendant la procédure de reconstruction.

II.4.2.2. Echange des *voxels* : critère de sélection

Les *voxels* à échanger peuvent être choisis, de façon aléatoire, librement ou par un critère de sélection. Zhao a montré [36] que l'application d'un critère de sélection présente l'avantage de détecter, lors de la reconstruction, les *voxels* les plus fragiles dans le domaine ce qui ajoute à l'amélioration de la qualité de la structure résultante d'une part, et d'autre part accélère le calcul et donc baisse le coût. Plusieurs tests montrent que l'application de cette procédure converge rapidement vers une énergie minimale.

D'une manière générale, si un *voxel* **A** est entouré par d'autres *voxels* de la même phase, on peut le considérer stable ou bien moins fragile qu'un autre *voxel* **B** entouré par des *voxels* d'une phase différente. La sélection du *voxel* **B**, pour un échange ultérieur, ne détruit pas un amas (*cluster*). C'est pour cette raison que la sélection du *voxel* **A** n'est pas la meilleure.

Pour un milieu poreux, dans le cas de la phase des pores : un *voxel* est d'abord choisi aléatoirement puis sa connectivité à ces 26 voisins est étudiée. Dans cette étude, les 6 directions principales ainsi que les 20 directions diagonales sont scannées (Figure II–9). On désigne par N_p le nombre de voisins qui sont définis comme « pores ». Si la connectivité est inférieur à un nombre N_p conventionnel, le *voxel* est sélectionné, sinon il est abandonné et un autre est recherché. La même procédure est appliquée lors de la sélection d'un *voxel* de la phase solide. Ici, N_s définit le nombre de voisins qui appartiennent à la phase « solide ».

Cependant, à un certain moment une configuration est obtenue, où il n'existe plus de *voxels* à échanger, sans pour autant que la valeur de l'énergie soit minimale. Pour remédier ce défaut, une légère modification dans l'étape de sélection est appliquée en sorte que le nombre conventionnel des voisins (soit N_P ou N_S) soit incrémenté après une série d'essais de sélection avortées. Cette incrémentation conditionnelle garantit la souplesse et la continuité de la procédure de reconstruction sans générer de temps de calcul supplémentaire [48].

La valeur de N_p et N_s dépendent fortement de l'expérience et de l'observation de l'image bidimensionnelle de référence. En générale elle varie entre 4 et 12.

II.4.2.3. Paramètre de contrôle T « température du recuit »

La « température du recuit » joue un rôle déterminant sur la qualité de la structure reconstruite. Elle est choisie de sorte qu'elle permette la convergence progressive vers l'état désiré le plus rapide possible et en évitant le piège d'un minimum local d'énergie. Deux variables sont distinguées ici: la « température » initiale et la « température du recuit ».

II.4.2.3.1. Comment déterminer la « température » initiale ?

Un point important pour la convergence est le choix de la « température » initiale, qui doit être choisie suffisamment élevée pour permettre au système de changer aisément de minimum local pendant les premières étapes de la simulation.

Le schéma classique proposé dans la littérature [18, 30, 42] est suivi ici. L'estimation de la « température » initiale est fondée sur le comportement initial de la fonction de coût E après certain nombre de solutions acceptées t_0 , la moyenne des sauts de la fonction de coût ΔE est calculée :

$$\overline{\Delta E} = \frac{1}{t_0} \sum_{t=1}^{t_0} \Delta E^{(t)}$$
(Eq. II-20)

puis, pour une valeur de probabilité déterminée P_0 , la « température » initiale du recuit T_0 est estimée par l'expression :

$$P_0 = e^{-\overline{\Delta E}/T_0}$$
 (Eq. II-21)

Les valeurs de t_0 et P_0 sont généralement 1000 et 0.8, respectivement.

II.4.2.3.2. Comment abaisser la « température » de recuit ?

En fait, la « température » est élevée, elle permet l'évolution rapide de la configuration initiale du système et donc l'acceptation de toutes les solutions. Après certain nombre d'itérations la diminution de cette « température » est indispensable.

Plusieurs propositions ont été faites pour réduire la « température » de recuit au cours du processus de reconstruction, parmi lesquelles le schéma classique et le schéma en chaines de Markov.

II.4.2.3.2.1. <u>Schéma classique</u>

Ce schéma « statique » est le plus rapide et le plus usuel en raison de la souplesse de sa programmation. Après un nombre prédéfini de solutions ou un certain nombre de solutions acceptées $t_{reduced}$, la « température » du recuit est tout simplement réduite par un facteur λ varie entre 0 et 1 :

$$T_m = \lambda^m T_0 \tag{Eq. II-22}$$

m étant le nombre de chaines de Markov. Une chaine de Markov représente un nombre prédéfini de solutions (acceptées).

II.4.2.3.2.2. <u>Schéma des chaines de Markov</u>

Par ce schéma « dynamique », le taux de réduction de la « température » est régit par le programme du recuit, et la variation de la valeur de la fonction de coût est prise en charge lors de la réduction. Ce programme doit être choisi de manière à ce qu'un optimum global soit atteint le plus rapidement possible. En pratique, *T* est réduit par le facteur λ après un certain nombre prédéfini d'échanges, appelé chaine de Markov. Ce facteur est calculé au moyen de la relation [31, 49] :

$$\lambda = Max \left[\lambda_{\min}, Min \left(\lambda_{\max}, \frac{E_{\min}^{Markov}}{\overline{E}^{Markov}} \right) \right]$$
(Eq. II-23)

 λ_{\min} et λ_{\max} sont les facteurs maximum et minimum permis pour la réduction. A chaque chaine de Markov, c'est-à-dire après $t_{reduced}$ échange, les valeurs minimum E_{\min}^{Markov} et moyenne \overline{E}^{Markov} de la fonction de coût sont extraites pour le calcul du facteur de la réduction λ . La température du système est donc mise à jour par :

$$T = T_0 e^{(\lambda - 1)(m+1)}$$
 (Eq. II-24)

 T_0 est la température initiale et *m* est le nombre de chaines de Markov après un total nombre de $t_{reduced}$ échange.

La valeur de $t_{reduced}$ dépend de la taille de domaine à reconstruire. Pour un domaine de 100^3 voxels par exemple, il paraît que 10^3 est bon. Les valeurs de λ_{min} et de λ_{max} sont comprises entre 0 et 1.

II.4.2.4. Critères de convergence

Le calcul s'achève pratiquement après certain nombre de rejections consécutives $MAX_REJECTIONS$, ou lorsqu'une certaine valeur d'énergie minimale E_{min} est atteinte. La valeur de $MAX_REJECTIONS$ signifie qu'à un instant donné, le système ne contient plus de solution qui permette de poursuivre la minimisation de l'énergie ce qui se traduit par la nécessité d'arrêter le calcul.

II.4.2.4.1. Valeur d'énergie minimum

Le choix de la valeur E_{\min} , vue aussi comme la tolérance, joue un rôle très important sur la qualité de la structure finale résultante de la procédure de la reconstruction. Jiao et al. [37] montrent que, pour l'algorithme d'échantillonnage orthogonal, E_{\min} est relié linéairement à la taille du domaine N par :

$$E_{\min} = \frac{1}{N^4}$$
(Eq. II-25)

et le taux de pixels mal placés d'une phase par rapport au nombre total des pixels est :

$$\gamma = \frac{N_{mp,i}}{N_i} = \frac{1}{\phi_i} N^2 E_{\min}$$
(Eq. II-26)

En d'autres termes, pour E_{min} prescrite, la reconstruction se termine à cette valeur avec un certain nombre de *voxels* mal placés. Ces voxels n'ont plus d'influence sur les propriétés du milieu reconstruit.

La valeur de E_{\min} est définie dès le départ et elle est comprise entre 10^{-5} et 10^{-12} .

II.4.2.4.2. Valeur de rejections successives maximales

Comme indiqué, après certain nombre de solutions consécutives non acceptées puisqu'elles ne vérifient pas le critère de minimisation défini par Eq. II-15 ou Eq. II-16 le domaine reconstruit est 'bloqué' et la recherche ultérieure des solutions devient inutile. Le paramètre *MAX_REJECTION* dans cette étude était entre $3.2 \times 10^4 - 10^5$ solutions selon l'importance du problème exposé.

II.4.2.4.3. Nombre d'itérations maximum

Il est parfois nécessaire de terminer la procédure de reconstruction après un certain nombre d'itérations N_{iter_MAX} . Ce nombre est estimé en fonction de la taille de grille choisie pour le domaine à reconstruire. Le fait d'augmenter ce nombre n'a pas d'influence sur le temps de calcul, et une valeur maximale de 9×10^6 solutions peut donc être imposé.

II.4.3. Algorithme d'échantillonnage orthogonal

A chaque échange de *voxels* les fonctions statistiques de la structure seront recalculées, et on comprend que le rendement d'un outil numérique de reconstruction dépendra fortement de la méthode adoptée pour ce calcul répétitif. Yeong et Torquato ont introduit [18] l'algorithme d'échantillonnage orthogonal (en anglais, *Orthogonal Sampling Algorithm*).

En fait, l'étape qui consomme le plus du temps dans le schéma du recuit simulé est la détermination de la fonction de coût *E* à travers le calcul répétitif de la fonction de corrélation S_2 (dans le cas d'une seule information statistique) à chaque échange de *voxels*. Ce calcul peut être considérablement amélioré en observant qu' une fois la fonction S_2 calculée pour la structure initiale tridimensionnelle, il n'est plus nécessaire d'échantillonner les structures intermédiaires puisque le changement de la fonction S_2 sera seulement lié au changement des trois plans *X*, *Y* et *Z* que contiennent les *voxels* modifiés. Cette modification de la valeur de S_2

peut être simplement évaluée en invoquant la procédure d'échantillonnage des rangs, des colonnes et des lignes qui contiennent ces *voxels*, ce qui est un ajustement des valeurs de S_2 initialement stockées.

Un bon choix de la longueur de référence R_{max} améliore le rendement de cet algorithme, et abaisse le temps du calcul réel. En général, dans le cas d'un système avec un ordre à longue distance, cette longueur ne dépasse pas la moitié de la dimension linéaire du milieu reconstruit.

Il est bon de savoir que cet algorithme est valable dans le cas où le milieu est défini comme isotrope.

II.4.4. Schéma de reconstruction « hybride »

La signification du terme « hybride » ici correspond à l'incorporation de plusieurs informations morphologiques dans la procédure de minimisation quand est reconstruit, de façon stochastique, un domaine tridimensionnel à partir d'une image de référence bidimensionnelle. Ce schéma peut, théoriquement, éliminer les points faibles dus à l'exploitation d'une fonction statistique unique.

Plusieurs schémas sont proposés dans la littérature, dans lesquelles soit deux sources d'informations morphologiques sont utilisées [15, 18, 19, 36], soit l'initialisation de la structure du milieu [42] est différente. Ici, comme indiqué, le schéma hybride intègre la fonction de corrélation 2-points et la fonction du chemin linéaire dans une procédure de reconstruction. La procédure de minimisation pour le cas d'un milieu périodique et isotrope est décrite par une forme modifiée de la relation générale (Eq. II-17).

$$E = \sum_{i=1}^{i=\bar{R}} \left\{ \left[S_2^{sim}(i) - S_2^{ref}(i) \right]^2 + \left[L_p^{sim}(i) - L_p^{ref}(i) \right]^2 \right\}$$
(Eq. II-27)

 \vec{R} étant toujours la longueur de référence (exprimée en *pixels*).

II.4.5. Algorithme « Lattice-Point »

Cet algorithme est proposé par Jiao et al. [35, 37] et développé spécialement pour les problèmes traités avec une seule information sur la morphologie celle de la fonction de

corrélation 2-points.

Cet algorithme efficace préserve l'isotropie de la structure. Il est fondé sur le balayage de la totalité de la structure et dans toutes les directions possibles. Avec cet algorithme, au lieu de considérer le domaine digital comme l'ensemble de *pixels* ou *voxels* noires et blancs il est considérée qu'une seule phase, celle de *pixels* noirs, vue comme des molécules gazeuses sur un réseau particulier. Ces molécules sont soumises à la condition de l'impénétrabilité [50] ce qui préserve la fraction volumique de la phase concernée. La référence [37] présente en détail cet algorithme. Figure II–14 compare les deux résultats de reconstruction bidimensionnelle du milieu présenté en (a) en utilisant l'algorithme « lattice-point » (b) puis l'algorithme d'échantillonnage orthogonal (c).



Figure II–14 : Reconstruction bidimensionnelle de l'image binaire de référence (a) avec $\phi = 0.34$ (*pixels* en noir), (b) résultat de la reconstruction via l'algorithme « lattice-point » et (c) résultat de la reconstruction via l'algorithme d'échantillonnage orthogonal.

II.5. Applications

Après avoir discuté les différentes propositions et schémas déjà élaborés, les résultats préliminaires obtenu son présentés ci-dessous en appliquant l'algorithme général illustré en Figure II–13 ainsi que les modifications apportées à cet algorithme chaque fois que nécessaire. Ces résultats sont toujours dans le cas de la reconstruction tridimensionnelle d'un milieu bi-phasique à partir d'une image binaire (digitale) bidimensionnelle dans laquelle sont distinguées deux phases : phase A représentée en pixels noirs et phase B représentée en pixels blancs.

Pour présenter nos travaux et résultats, un outil numérique fondé sur le langage de programmation Visual Basic V06 est développé au sein du laboratoire. Cet outil a l'avantage d'une part d'être construit avec un langage simple et lisible, et d'autre part, il permet la visualisation simultanément au cours de la procédure de la reconstruction ce qui simplifie considérablement le travail.

La reconstruction d'un milieu bi-phasique, adoptée ici, est implicitement fondée sur deux hypothèses.

- 1. Le milieu est supposé stationnaire et en équilibre thermodynamique.
- Toutes les informations sur la morphologie d'une phase du milieu sont supposées contenue dans deux fonctions : la fonction de corrélation 1-point et la fonction de corrélation 2-points.

Le domaine à reconstruire est supposé isotrope. Le cas d'un domaine anisotrope bien qu'envisageable n'est pas étudié ici.

II.5.1. Sélection d'une image de référence

Soit un matériau poreux de porosité ϕ (ϕ est ici la valeur réelle obtenue par voie expérimentale), il est possible d'ajuster le niveau de seuil appliqué à l'image MEB qui décrit la structure du matériau de sorte que l'image binaire obtenue vérifie la valeur ϕ de la porosité. L'ajustement se fait à l'aide de l'histogramme du niveau de gris des pixels en fonction [51], Figure II–15.



Figure II–15 : Image MEB d'un échantillon de cordiérite (a) et image binaire obtenue par l'application d'une valeur du seuil qui maintient une valeur de porosité $\phi = 42\%$ (b).

Dans le cas où cette image reflète la microstructure d'un matériau céramique poreux, une de ces deux couleurs représente la phase continue tandis que l'autre représente la phase des pores.

II.5.2. Influence de la condition de bords périodiques

Un milieu périodique est un milieu qui se répète cycliquement après un certain intervalle d'espace. Soit L la condition de frontières périodiques qui garantit la continuité d'un milieu périodique. A chaque fois que la condition de la périodicité est appliquée, le système est conceptuellement infiniment large ce qui justifie la valeur moyenne calculée pour la fonction S_2 en Eq. II-4.

Sur l'exemple présenté en Figure II–16, on constate une influence négligeable sur la fonction S_2 quand on applique la condition de bords périodiques.

Dans le calcul, la condition de la périodicité est implicitement inclue.

II.5.3. Influence de l'isotropie du milieu étudié

Le même constat que celui fait en Figure II–16 s'impose quand la fonction S_2 ou la fonction L_P d'un matériau isotrope est étudiée dans une de deux directions principales, comme le montre la Figure II–17.



Figure II–16 : (a) Image MEB de SiC de taille 712x484 *pixels*, (b) image binaire de référence de 400x400 *pixels* et (c) influence négligeable sur la fonction S_2 est constatée quand la condition de bords périodiques est appliquée.



Figure II–17 : Pour le milieu présenté en Figure II–16-b, une influence négligeable sur les résultats est constatée quand la fonction S_2 (a) et la fonction L_p (b) sont étudiée selon l'une ou l'autre des deux directions orthogonales principales.

II.5.4. Reconstruction de disques

Par la suite, c'est le résultat de la reconstruction du domaine illustré en Figure II–18-a dans l'espace tridimensionnel. Ce domaine se compose de disques noirs de *d pixels* de diamètre, définis comme phase **A** (à reconstruire), placés de façon périodique dans une cavité carrée, définie comme phase **B**. Ce cas est important pour des applications diverses dans le domaine de la science des matériaux [17] et il très fréquent dans les applications industrielles. Cette configuration illustre l'ordre à courte distance.

La simulation commence avec une structure initiale aléatoire dont Figure II–18-b représente une coupe, générée à l'aide de la valeur de fraction volumique de la phase **A** $\phi_A = 0.312$. La taille du domaine à reconstruire est de 100^3 *voxels* et seule la fonction S_2 est calculée pour la structure 3D.

La Figure II–19 présente une structure proche de celle de sphères périodiques dans un cube. En fait, on ne peut pas retrouver de vraies sphères (Figure II–18-d et Figure II–18-e) pour deux raisons :

- les disques présentés dans l'image en Figure II–18-a sont bidimensionnelles et elles peuvent être des coupes droites ou inclinées dans des sphères ou dans des cylindres,
- 2. le balayage du domaine, lors de l'étude de S_2 dans la structure 3D, se fait selon les directions principales orthogonales et les autres directions ne sont pas considérées.



Figure II–18 : Résultat de la reconstruction 3D des disques. (a) Image binaire de référence (100x100 *pixels*) de disques périodiques dans une cavité carrée, (b) coupe dans le domaine initial 3D à *Y*=50 *pixels*, (c) évolution de la structure initiale à plusieurs étapes intermédiaires durant la simulation à *Y*=50 *pixels*, (d) coupe dans la structure finale à *Z*=50 *pixels*, (e) coupe dans la structure finale à *Y*=50 *pixels*, (e) coupe dans la structure finale à *Y*=50 *pixels*, (e) coupe dans la structure finale à *Y*=50 *pixels*, (e) coupe dans la structure finale à *Y*=50 *pixels*, (e) coupe dans la structure finale à *Y*=50 *pixels*, (e) coupe dans la structure finale à *Y*=50 *pixels*.

Le même rangement des amas noirs est reproduit. En fait, la solution du problème de la reconstruction n'est pas unique; il est possible d'obtenir une infinité de structures statistiquement vraisemblables et différentes pour la même courbe à partir de la fonction statistique.



Figure II-19 : Représentation en 3D de la structure reconstruite en Figure II-18-a.

En Figure II–20 la fonction de corrélation 2-points en fonction de la longueur de référence R est tracée. Le fait de changer cette longueur impose une légère modification sur la structure finale constatée par une baisse de la valeur de E_{min} .

II.5.5. Reconstruction d'un damier

En Figure II–21 une image binaire d'une taille du réseau de 104x104 *pixels* dans laquelle les deux phases ont la même fraction volumique $\phi_b = \phi_n = 0.5$ (l'indice *n* pour les *pixels* noirs et *b* pour les *pixels* blancs), il s'agit d'une matrice d'inclusions carrées distribuées de façon régulière. Cette structure, complètement déterminée (elle n'est donc pas arbitraire), illustre la capacité de la procédure de reconstruction à reproduire la structure souhaitée avec une précision acceptable.

Ce type de structure peut être imaginé comme une coupe dans un matériau bi-phasique composite ce qu'il donne l'importance d'une telle structure et ses propriétés physiques en science des matériaux.







Figure II-21 : Résultat de la reconstruction 3D d'un damier : (a) Image binaire de référence de 104x104 *pixels*, (b) coupe dans le domaine initial 3D à Y=57 *pixels*, (c) coupe dans la structure finale à X=14 *pixels*, (d) coupe dans la structure finale à Y=54 *pixels*, et (e) coupe dans la structure finale à Z=61 *pixels*.





Figure II–22 : Fonction de corrélation S_2 du milieu étudié en Figure II–21-a pour deux valeurs de longueur de référence : (a) $R_{\text{max}} = 26$ pixels, $E_{\text{min}} = 5.5 \times 10^{-5}$, (b) $R_{\text{max}} = 104$ pixels, $E_{\text{min}} = 1.1 \times 10^{-4}$. Tous les autres paramètres de simulation sont gardées constants.

Cule et Torquato [19] ont présenté dans leur travail les résultats de la reconstruction bidimensionnelle selon un algorithme rapide de transformé de Fourrier (FFT) pour calculer la fonction de corrélation S_2 modifiée après chaque échange de *pixels*. Un avantage de cette méthode peut être le balayage d'autre directions diagonale ou axiale, mais au détriment de l'efficacité de la procédure et au prix d'un coût élevé du temps de calcul ainsi que de la limitation du réseau à un nombre de *pixels* de l'ordre de 2^n .

Le fait de balayer la totalité du système et donc de choisir une longueur de référence

de 104 *pixels* n'a pas d'influence sur la structure finale obtenue pour la procédure de reconstruction ce qui est montrée en Figure II-22.

La Figure II–23 présente les résultats de la reconstruction d'une autre configuration dans laquelle la phase de reconstruction représente $\phi = 0.3$.



Figure II–23 : (a) Structure de 134x134 *pixels* avec une fraction volumique de $\phi = 0.3$ à reconstruire. Le résultat de la reconstruction 3D sont (b) une coupe dans la structure finale à *X*=110 *pixels*, (c) une coupe dans la structure finale à *Y*=111 *pixels*, et (d) une coupe dans la structure finale à *Z*=121 *pixels*.

Encore une fois l'exactitude des résultats n'est pas parfaite en raison de l'étude de la structure 3D selon trois directions orthogonales seulement. L'étude d'autres directions peut améliorer les résultats au détriment du temps de calcul.

II.5.6. Reconstruction d'un matériau céramique poreux

Dans la suite, la reconstruction de la structure Figure II–24-a est présentée. Il s'agit d'un matériau céramique de carbure de silicium *SiC* étudié par Politis et al. [42]. L'image digitale est de 167x167 *pixels* avec une taille de *pixel* ~2 μm . La phase représentée en noir sera reconstruite avec une valeur de la fonction de corrélation 1-point $\phi = 0.42$. La taille de

domaine 3D est 122^3 voxels.



Figure II–24 : Image binaire de SiC (a) et représentation de la fonction S_2 (b). Taille de l'image est 167x167 *pixels* avec une taille du *pixel* ~2 μm (référence [42]).

La simulation commence avec la génération d'une structure aléatoire contrôlée par la fraction volumique $\phi = 0.42$. La valeur d'une fonction de coût de $E = 10^{-12}$ est atteinte et la simulation est terminée. Figure II–25 est l'exemple de la structure tridimensionnelle résultante.



Figure II-25 : Résultat de la reconstruction de la structure présentée en Figure II-24-a. Le volume de pores est en noir.

II.6. Conclusion partielle

La reconstruction stochastique d'un milieu poreux est présentée de façon détaillée dans ce chapitre. Cette reconstruction s'effectue à partir des informations morphologiques extraites statistiquement d'une image qui représente la microstructure du matériau.

Cette méthode de reconstruction est fondée sur le schéma de minimisation du recuit simulé (RS) à l'aide duquel les milieux isotropes ou anisotropes peuvent être reconstruits. Les informations morphologiques d'une image bidimensionnelle utilisées ici sont la corrélation 1-point ou la fraction volumique d'une phase ϕ , la fonction de corrélation 2-points S_2 et la fonction de chemin linéaire L_p .

Pour ce faire, un outil numérique de reconstruction stochastique est développé pour représenter les structures tridimensionnelles de différents matériaux céramiques poreux dont la valeur de la porosité ϕ est connue à partir de leur image de structure 2D. Cet outil est utilisé pour l'analyse structurale des matériaux testés. La structure résultante peut servir pour une estimation ultérieure des propriétés physiques du système étudié à l'aide d'un outil numérique approprié qui peut être fondé sur la méthode de discrétisation de Boltzmann sur réseau, thème du prochain chapitre.

Différents exemples de structures déterminées (régulières) ou aléatoires rencontrées dans le domaine de science des matériaux sont étudiés. La reconstruction stochastique par le schéma de minimisation du recuit simulé peut générer des configurations vraisemblables, du point de vue statistique, dans l'espace 3D.

Souvent les informations statistiques contenues dans la fonction de corrélation S_2 ne sont pas suffisantes pour la description complète de la (micro)structure qu'elles ne peuvent pas seules caractériser la microstructure même si un minimum global d' « énergie »est atteint. L'incorporation d'une deuxième fonction, comme la fonction du chemin linéaire L_p , améliore la qualité de la structure résultante dans la mesure où elle informe sur la connectivité de la phase reconstruite.

L'amélioration de l'isotropie de la structure reconstruite peut aussi se faire par balayage d'autres directions que les trois directions principales orthogonales par transformée de Fourrier rapide. Cette solution est efficace mais couteuse en temps de calcul.

Les milieux anisotropes, ce qui est le cas des dépôts plasma, peuvent être traités en choisissant des images de référence pour chaque direction principale.

Les faiblesses de la méthode de reconstruction stochastique par le schéma du recuit simulé sont les suivantes :

- 1. Sa nature aléatoire en raison du tirage aléatoire des voxels.
- 2. Des paramètres de contrôles empiriques.
- 3. Une connectivité de la phase reconstruite qui diminue avec la fraction volumique de cette phase.