

Table des matières

Table des figures	3
Abstract	10
Résumé	11
Introduction	13
1 État de l'art : fissuration du béton et méthodes statistiques	17
1.1 Le béton	17
1.1.1 Quelques pathologies affectant le béton	18
1.1.2 La phénoménologie de la fissuration	19
1.1.3 Hypothèses de travail	21
1.1.4 Simulation numérique à l'aide des Modèles de Zones Cohésives	21
1.1.5 Exemples de simulations XPER sur un béton numérique	25
1.2 Une stratégie de réduction du coût de calcul	27
1.2.1 Limitation actuelle et indicateurs locaux	28
1.2.2 Rappel sur les chaînes de Markov	29
2 Modèle de prédiction du trajet de fissure	35
2.1 Représentation de la microstructure et propagation de la fissure	35
2.2 Indicateurs géométriques locaux pour la caractérisation de la fissuration	37
2.2.1 Définition des indicateurs	38
2.2.2 Calculs des indicateurs locaux	39
2.2.3 Évaluation des indicateurs	42
2.3 Modèle probabiliste pour la prédiction de la trajectoire d'une fissure	45

2.4	Prédiction de la trajectoire d'une fissure avec le modèle probabiliste	48
3	Apprentissage et validation du modèle de prédiction	53
3.1	Estimation des paramètres du modèle : étape d'apprentissage	54
3.2	Prédiction de la fissure	58
3.3	Prédiction de la tortuosité du chemin de fissure	68
3.4	Influence de la base d'apprentissage	70
4	Application	75
4.1	Poutre en flexion trois points	75
4.2	Couplage entre le modèle probabiliste et un code mécanique Éléments Finis	77
4.2.1	Détermination de l'orientation de propagation locale de la fissure	78
4.2.2	Mise en œuvre numérique à l'aide du logiciel Cast3M	81
4.2.3	Couplage	86
4.2.4	Étude paramétrique	87
4.3	Prédiction et analyse des résultats	91
4.4	Conclusion et discussion	93
	Conclusion et Perspectives	95
	Bibliographie	99

Table des figures

1	Zones critiques du vieillissement des réacteurs sous pression (source : Médiathèque IRSN)	14
1.1	Les principales échelles du béton [1]	18
1.2	Exemple d'une dégradation du béton (RSI) [2]	19
1.3	Porosité de l'ITZ [1]	20
1.4	Faciès de rupture : les fissures contournent les granulats [3]	20
1.5	Principe d'une zone cohésive [4]	21
1.6	Schéma représentant la relation locale entre la contrainte cohésive et le saut de déplacement [2]	23
1.7	Courbe contrainte normale d'adhésion en fonction du saut de déplacement normal. En bleu, le comportement avant l'endommagement surfacique. En rouge, l'interface lorsque la fissure a commencé à se créer [2]	24
1.8	Exemples de microstructures générées avec des granulats carrés (VER-5 à droite et VER-33 à gauche)	25
1.9	Maillage du VER 5	26
1.10	Faciès de rupture pour les deux microstructures de la Figure 1.8 (VER-5 à droite et VER-33 à gauche) : rouge, déplacement vers le haut ; bleu, déplacement vers le bas . . .	26
1.11	Tortuosité, $\tau = \frac{l}{L}$ [1]	27
1.12	Covariogrammes associés aux deux microstructures de la Figure 1.10	29
2.1	Simulation XPER d'un trajet de fissure (gauche), microstructure granulaire discrète et approximation de la fissure associée (droite)	36
2.2	Exemples de champs de vision locaux (zone hachurée) en un point de discréétisation x , en fonction de la direction de propagation de la fissure $\vec{u_x}$. Tous les granulats de la zone hachurée sont considérés	37

2.3	Exemple de champ de vision local (zone hachurée) dans la configuration F1 (la pointe de fissure est signalée par un cercle blanc)	37
2.4	Exemple de champ de vision local (zone hachurée) dans la configuration F2 (la pointe de fissure est signalée par un cercle blanc)	38
2.5	Illustration de la procédure 2.2.1 : construction du cône de recherche (zone hachurée) afin de délimiter la zone d'ombre. La direction locale de propagation est supposée horizontale	41
2.6	Illustration de la procédure 2.2.1 : construction de la zone d'ombre (zone hachurée) et redéfinition du cone de recherche. La direction locale de propagation est supposée horizontale	41
2.7	Valeurs des indicateurs pour la configuration F1 associés aux points de la fissure pour des microstructures à granulats carrés (à gauche) et pour des microstructures à granulats multiformes (à droite) : évaluation de 4994 couples d'indicateurs (d, θ) choisis par les fissures issues de 35 microstructures à granulats carrés et 5343 couples d'indicateurs (d, θ) choisis par les fissures issues de 30 microstructures à granulats multiformes	43
2.8	Exemples de cas où la fissure traverse la matrice (point bleu) au lieu de suivre le granulat (point vert), le début du champ de vision est marqué par la ligne noire en pointillé	43
2.9	Valeurs des indicateurs pour la configuration F2 associés aux points de la fissure pour des microstructures à granulats carrés (à gauche) et pour des microstructures à granulats multiformes (à droite) : évaluation de 680 couples d'indicateurs (d, θ) choisis par les fissures issues de 35 microstructures à granulats carrés et 415 couples d'indicateurs (d, θ) choisis par les fissures issues de 30 microstructures à granulats multiformes	44
2.10	Illustration de la procédure 2.4.1 dans la configuration F2 avec un agrandissement dans la zone d'intérêt. Le champ de vision local est orienté selon la direction de propagation perpendiculaire à l'effort de traction. Le point orange est la pointe de fissure, les points rouges sont les points candidats du champ de vision local où la probabilité d'être atteint est évaluée par le modèle, le point vert est le point sélectionné après tirage aléatoire pondéré	49

3.1	Estimation des paramètres (moyenne et écart-type) en fonction de la taille de l'ensemble d'apprentissage dans la configuration F1. De haut en bas, paramètres associés à $\tilde{\theta}_x$, au terme d'interaction $\tilde{\theta}_x \times \tilde{d}_x$ et à \tilde{d}_x	56
3.2	Estimation des paramètres (moyenne et écart-type) en fonction de la taille de l'ensemble d'apprentissage dans la configuration F2. De haut en bas, paramètres associés à \tilde{d}_x , au terme d'interaction $\tilde{\theta}_x \times \tilde{d}_x$ et à $\tilde{\theta}_x$	57
3.3	Coefficient de variation (en pourcentage) calculé à partir de l'écart-type et de la moyenne des estimations des paramètres pour 100 ensembles d'apprentissage de 33 microstructures. Le graphique de gauche correspond à la configuration F1, le graphique de droite à la configuration F2	58
3.4	Valeurs des indicateurs dans les configurations F1 (à gauche) et F2 (à droite) associées aux points sur les réalisations médiennes pour les microstructures de l'ensemble d'apprentissage à granulats carrés	60
3.5	Valeurs des indicateurs dans les configurations F1 (à gauche) et F2 (à droite) associées aux points sur les réalisation médiennes pour les microstructures de l'ensemble test à granulats multiformes	60
3.6	Étude de l'influence du terme d'interaction dans le modèle pour la configuration F2, à gauche le comportement du modèle avec interaction et à droite le comportement du modèle sans interaction	61
3.7	Étude de l'influence du terme d'interaction dans le modèle pour la configuration F1, à gauche le comportement du modèle avec interaction et à droite le comportement du modèle sans interaction	62
3.8	Étude de l'influence du terme d'interaction dans le modèle pour la configuration F2. Cas où les modèles avec et sans interaction donnent les mêmes résultats	62
3.9	Paramétrisation des trajectoires de fissure. Les points rouges correspondent à une grille de discréétisation dans la direction x^1 , les points bleus sont les couples $\{(x^1, h_E^k(x^1))\}_{k=1,\dots,100}$. Le premier point bleu à gauche correspond à l'initialisation de l'algorithme de prédiction des trajectoires. Il est imposé par la position de la préfissure sur le bord gauche de la microstructure (préfissure non représentée sur la figure) . . .	64

3.10	Exemple de prédiction de trajectoire pour des granulats carrés (ensemble d'apprentissage) : simulation XPER (violet), fissure médiane (vert), région de confiance (rouge)	64
3.11	Exemple de prédiction de trajectoire pour des granulats multiformes (ensemble d'apprentissage) : simulation XPER (violet), fissure médiane (vert), région de confiance (rouge) . . .	65
3.12	Prédiction de la trajectoire de la fissure sur l'ensemble d'apprentissage (granulats carrés) : écart basé sur la distance de Fréchet entre la fissure médiane et la simulation XPER (vert), diamètre de la région de confiance (rouge)	65
3.13	Prédiction de la trajectoire de la fissure sur l'ensemble test (granulats multiformes) : écart basé sur la distance de Fréchet entre la fissure médiane et la simulation XPER (vert), diamètre de la région de confiance (rouge)	66
3.14	Prédiction de la trajectoire associée à la précision la plus faible, cas des granulats carrés (ensemble d'apprentissage) : simulation XPER (violet), fissure médiane (vert), région de confiance (rouge)	67
3.15	Prédiction de la trajectoire associée à la précision la plus faible, cas des granulats multiformes (ensemble test) : simulation XPER (violet), fissure médiane (vert), région de confiance (rouge)	67
3.16	Prédiction de la tortuosité sur l'ensemble test (granulats multiformes) : simulation XPER (violet), tortuosité médiane (vert), intervalle d'incertitude (rouge)	68
3.17	Histogramme de la tortuosité pour une microstructure de l'ensemble test	69
3.18	Comparaison des densités de tortuosité construites à partir des simulations XPER (bleu) et des prédictions du modèle (orange) pour les microstructures avec des granulats multiformes (densité obtenue par la méthode d'estimation par noyau gaussien)	70
3.19	Comparaison des distances de Fréchet entre la fissure médiane et la fissure XPER pour différentes bases d'apprentissage	71
3.20	Comparaison des diamètres de la région de confiance de prédiction pour différentes bases d'apprentissage	71
3.21	Comparaison des tortuosités médianes obtenues pour différentes bases d'apprentissage	72

3.22	Comparaison des largeurs de l'intervalle d'incertitude associé à la tortuosité obtenues à partir de différentes bases d'apprentissage	73
4.1	Poutre en flexion trois points avec fissure décentrée	76
4.2	Poutre en flexion trois points : faciès de rupture obtenu avec XPER	77
4.3	Poutre en flexion trois points : zoom dans la zone d'intérêt	77
4.4	Voisinage autour de la pointe de fissure dans lequel sont estimées les directions principales de contraintes [5]	79
4.5	Courbes d'iso-contraintes principales σ_I . Les creux des papillons correspondent aux points retenus pour déterminer la direction de propagation de la fissure	80
4.6	Sélection des points de Gauss [5]	80
4.7	Détermination de l'angle de propagation [5]	81
4.8	Illustration de la procédure 4.2.1	83
4.9	Visualisation avec GMSH d'une portion de la fissure avec épaisseur	83
4.10	Maillage avec GMSH [6] d'une microstructure fissurée	84
4.11	Agrandissement du maillage avec GMSH [6] d'une microstructure fissurée	84
4.12	Illustration des champs de contraintes principales σ_I en pointe de fissure	85
4.13	Algorithme de couplage du code mécanique et du modèle probabiliste	87
4.14	Mesure de la distance de Fréchet entre la fissure prédite et la fissure XPER en fonction du rayon du voisinage en mètre et de l'épaisseur de fissure en mètre. Chaque cercle représente, en fonction de sa taille, une distance par rapport à XPER. Le rayon et l'épaisseur sont donnés en mètres	88
4.15	Mesure de la distance de Fréchet entre la fissure prédite et la fissure XPER en fonction de la distance de propagation	89
4.16	Poutre en flexion trois points : prédiction (courbe verte) et simulation XPER (courbe violette) et en rouge la région de confiance	92
4.17	Agrandissement de la Figure 4.16	92

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier l'ensemble de mes encadrants. Vous avez su me guider, m'aider, me corriger s'il le fallait, et de manière générale m'apporter vos différentes expertises pour que les contributions scientifiques proposées dans cette thèse soient les plus abouties et les plus adaptées aux problématiques rencontrées. Bien qu'un encadrement à 6 personnes issues de 3 entités différentes ait parfois nécessité un peu de jonglage dans les échanges d'informations, cela m'a permis de bénéficier de points de vue complémentaires et enrichissants.

Je tiens à remercier mes deux directeurs de thèse, messieurs Jacques Liandrat et Loïc Daridon, pour la confiance qu'ils m'ont accordé en acceptant d'encadrer ce travail doctoral, et pour leur multiples conseils.

Je remercie également monsieur Jean Baccou pour sa grande disponibilité et ses qualités d'écoute et de compréhension tout au long de la thèse. Sa rigueur, sa capacité d'analyse des problèmes, et ses connaissances m'ont permis de progresser, et ont répondu à plusieurs de mes préoccupations.

Je souhaiterais également remercier monsieur Yann Monerie, qui s'est toujours montré disponible et intéressé par l'avancée de mes travaux, malgré un emploi du temps très chargé. Ses remarques et son expertise ont beaucoup apporté dans le résultat final de ce travail.

Je voudrais remercier monsieur Thibaut Le Gouic pour sa disponibilité malgré un important éloignement géographique. Sa connaissance en modélisation probabiliste m'a permis d'appréhender les défis complexes soulevés par cette thèse.

Je remercie également monsieur Frédéric Péralès pour son expertise sur le logiciel XPER, et les nombreux calculs lancés parfois même à la dernière minute. Ses explications sur la mécanique des matériaux m'ont permis de mieux comprendre la complexité du phénomène de fissuration dans les matériaux hétérogènes.

Ce fut un plaisir de travailler avec vous tous durant ces trois années, aussi bien sur le plan scientifique que humain. J'ai beaucoup appris dans le domaine de la statistique, du machine learning et de la mécanique, ainsi que sur la façon de mener à bien un projet de recherche, grâce à vos conseils, vos idées, et vos nombreux retours. Ce manuscrit n'aurait pas vu le jour sans vous, et je vous en suis très reconnaissante.

Je souhaiterais également remercier Messieurs David Dureisseix et Bertrand Ioos d'avoir accepté de rapporter mes travaux de thèse. La version

finale de ce mémoire a bénéficié de leur lecture très attentive, et de leurs remarques précieuses. Je tiens à remercier Monsieur Renald Brenner d'avoir accepté de présider mon jury. Je remercie également mes examinateurs Madame Amandine Marrel et Monsieur David Ginsbourger pour leurs questions pertinentes. Ce jury de qualité a fait de cette soutenance un moment mémorable.

Je remercie chaleureusement les étudiants de Polytech Montpellier avec qui j'ai eu la chance de travailler. Un grand merci à William Le Goff, Lucas Cuisset et Lucas Depieds pour leur investissement dans le projet portant sur l'élaboration du code mécanique présent dans le chapitre 4. Un remerciement particulier à William Le Goff pour son aide et sa grande disponibilité, et pour ses réponses détaillées à mes nombreuses questions.

Je remercie l'équipe du laboratoire de Statistique et des Méthodes Avancées de l'IRSN Cadarache pour son accueil chaleureux. Ce fut un plaisir de partager avec vous des moments de convivialité autour d'un café et de pâtisseries maison (je parle bien évidemment ici d'une ère lointaine avant-covid). Je remercie également l'équipe du LMG à Montpellier pour son accueil, et la gentillesse des nombreux doctorants présents.

Ma profonde gratitude va ensuite à mes parents. Leur foi en moi et leur soutien m'ont été primordiaux. Je remercie aussi ma grande amie Morgane pour son soutien et nos nombreuses discussions. Je te souhaite une belle réussite dans ton projet de thèse !

Enfin, je remercie tout particulièrement mon compagnon Samy qui partage ma vie depuis maintenant 4 ans. Je le remercie pour ses encouragements, et pour le temps qu'il a consacré à écouter mes présentations. Je te remercie pour ton amour et ton soutien quotidien.

Enfin j'aurais une petite pensée pour nos deux petits chats, toujours présents pour dormir près de mon ordinateur lors de mes soirées de travail.

Abstract

The ageing of French nuclear power plants raises many research issues in nuclear safety analysis. The phenomena involved in the ageing of structures are mainly due to the development of pathologies, in particular internal swelling reactions. They can lead to concrete degradation and more specifically to the cracking of the corresponding structures. In order to study these pathologies and to be able to predict further degradation, it is necessary to carry out numerical simulations using full-field mechanical codes at mesoscopic scale. However, each simulation is costly in term of computational time. This remains a strong limitation for industrial applications where a large number of simulations are often required to perform the whole mechanical analysis. Therefore, in order to circumvent this limitation, this work is devoted to the construction of a new fast-to-evaluate mathematical model to predict the cracking trajectory in a microstructure. This construction is performed in two steps. Starting from mechanical considerations, the first one concerns the introduction of indicators that provide information on the local behavior of a crack. In the second step, these indicators are integrated in a Markov Chain prediction model whose parameters are estimated from a learning set coming from computer code simulations. The model is then integrated in a cracking propagation algorithm that provides a set of trajectory realizations. This set can be exploited to derive a single cracking trajectory and to quantify the prediction uncertainty.

The analysis of the performances of the new model is then conducted. It exhibits the agreement between the predictions and the computer code simulations (XPER in our study). Moreover, one can observe a significant reduction of the computational time, a few minutes on a processor to obtain the complete cracking path with a reasonable uncertainty whereas the XPER simulation can take several days on a few dozen of processors. The new model is finally applied to a three-point bending beam test. It requires coupling the model to a Finite Elements mechanical code to derive the local cracking direction based on the local stress fields. The results show that the model is able to accurately predict the crack simulated by the XPER code. Moreover, the prediction is performed in few hours whereas the simulation takes about 100 days on 81 processors.

Résumé

Le prolongement de la durée d'exploitation des centrales nucléaires françaises soulève de nombreuses questions de recherche sur le vieillissement des ouvrages de génie civil nucléaire. Les phénomènes intervenant lors de ce vieillissement sont principalement liés au développement de pathologies, notamment les réactions de gonflements internes. Ces phénomènes sont susceptibles en particulier de dégrader le béton et de conduire à l'apparition de fissures dans les structures touchées. Afin d'étudier les différentes pathologies et leurs conséquences sur la structure, des simulations numériques à l'aide de codes mécaniques à champ complet (à l'échelle mésoscopique) sont réalisées. Cependant, chaque simulation est coûteuse en temps calcul, ce qui est un frein dans les applications industrielles nécessitant un grand nombre de simulations. Pour limiter les coûts, on s'intéresse dans ce travail à la construction d'un modèle mathématique rapide à évaluer pour la pré-diction de chemins de fissuration. Sa construction se fait en deux étapes. La première consiste à définir à partir de considérations mécaniques plusieurs indicateurs apportant des informations sur le comportement local de la fissure. La seconde est le développement d'un modèle probabiliste à base de chaînes de Markov intégrant ces indicateurs et permettant de prédire de proche en proche une trajectoire. Une fois les paramètres du modèle estimés à partir d'un ensemble d'apprentissage de microstructures numériquement fissurées, ce modèle est intégré dans un algorithme de propagation de fissure qui détermine les chemins locaux les plus probables pour la trajectoire de la fissure. Ainsi, à partir d'une microstructure donnée, il est possible de prédire le chemin de fissuration et de quantifier l'incertitude associée. Une analyse des performances du modèle est ensuite conduite. Elle montre la cohérence entre les informations fournies par le modèle et les fissures simulées par le code mécanique (XPER dans notre étude). De plus, le temps de calcul du modèle est très significativement réduit par rapport à une simulation à champs complets (XPER). Il est de l'ordre de quelques minutes sur un processeur pour l'obtention du chemin de fissuration complet avec une incertitude raisonnable alors que la simulation XPER peut atteindre plusieurs jours sur une dizaine de processeurs. Le nouveau modèle est enfin appliqué sur une expérience classique dans le domaine des matériaux cimentaires, une poutre en flexion trois points. La mise en œuvre de cette étude nécessite le couplage avec un code mécanique Eléments Finis afin de déterminer localement la direction de propagation de fissure. Les résultats montrent une estimation du trajet de fissure en accord avec la simulation XPER. Cette estimation est obtenue en quelques heures alors que la simulation XPER dure environ 100 jours sur 81 processeurs.

Introduction

Le prolongement de la durée d'exploitation des centrales nucléaires françaises soulève de nombreuses questions sur le vieillissement des ouvrages de génie civil nucléaire. Pour y répondre, l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire) effectue des recherches afin d'améliorer la surveillance et l'évaluation des risques liés aux mécanismes de vieillissement des matériaux. Ces recherches portent en particulier sur l'enceinte de confinement qui représente un élément important pour la sûreté des installations nucléaires. En effet, elle constitue la troisième et dernière barrière de confinement (Figure 1) d'un relâchement de produits radioactifs dans l'environnement lors d'une hypothétique situation accidentelle.

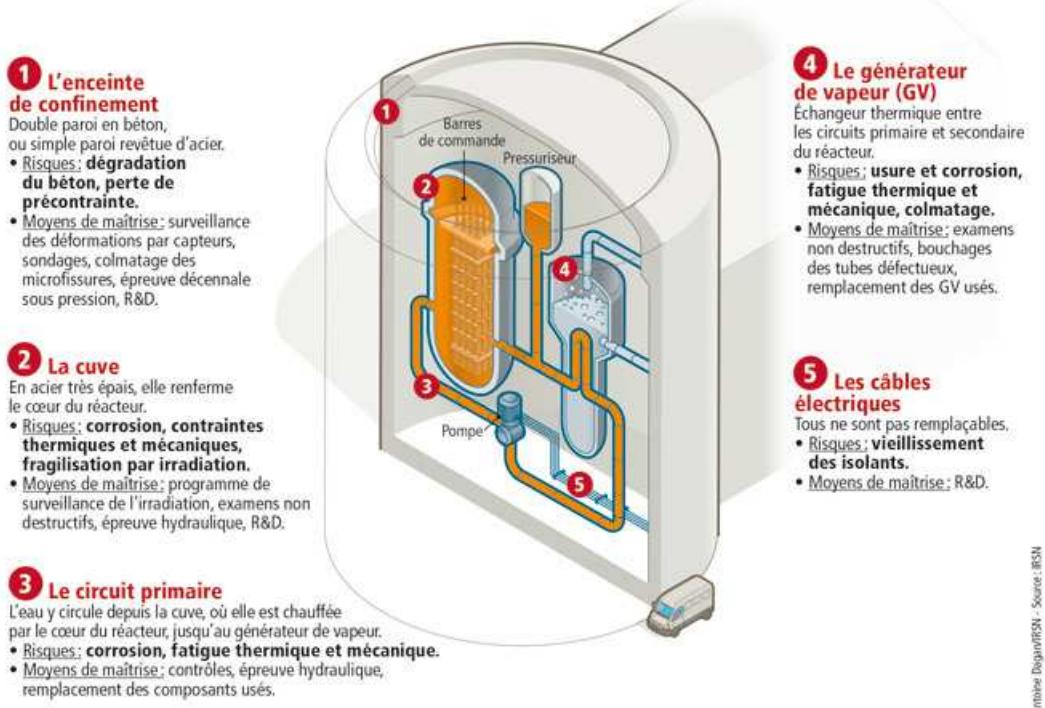
Les phénomènes intervenant lors du vieillissement des ouvrages de génie civil sont principalement liés au développement de pathologies, notamment les réactions de gonflements internes (RGI). Ces phénomènes sont susceptibles de dégrader le béton et de conduire à l'apparition de fissures dans les structures impactées [7]. Ces réactions sont généralement lentes, pouvant atteindre plusieurs dizaines d'années [8].

Afin d'étudier les couplages entre les différentes pathologies et leurs conséquences sur la structure, des simulations numériques permettent d'accéder à des grandeurs physiques difficilement atteignables expérimentalement [2]. Ces simulations nécessitent la génération de structures numériques représentatives [9, 3]. La génération de bétons numériques est généralement basée sur des descripteurs morphologiques [10, 1, 11] qui synthétisent des informations statistiques et géométriques issues de l'analyse de bétons réels. Les différentes dégradations sont étudiées à partir de ces représentations numériques, à l'aide d'outils de simulation pour la fissuration [12, 2].

Dans le cadre des recherches relatives à la sûreté des réacteurs à eau sous pression, l'IRSN en collaboration avec le LMG (Laboratoire de Mécanique et Génie Civil) au travers du laboratoire commun MIST (Laboratoire de Micromécanique et Intégrité des Structures) a développé une approche micromécanique pour l'analyse de la tenue des matériaux lors de transitoires

Les zones critiques du vieillissement des réacteurs sous pression

Certains éléments d'une centrale nucléaire sont particulièrement sensibles. Lors de ses expertises, l'IRSN s'intéresse à leur vieillissement afin de garantir la sûreté des installations.



Antoine Bogaerts/IRSN - Source : IRSN

FIGURE 1 – Zones critiques du vieillissement des réacteurs sous pression (source : Médiathèque IRSN)

accidentels hypothétiques [13]. Cette approche repose sur les notions de Modèles de Zone Cohésive Frottante (MZCF) [14] et de méthodes de modélisation numérique des systèmes multicorps basées sur l'approche Non Smooth Contact Dynamics (NSCD) [15]. La plate-forme de simulation numérique associée, XPER[16, 17] permet de traiter en grandes déformations l'initiation et la propagation tridimensionnelle de multi-fissures dans des matériaux hétérogènes.

Cependant, chaque simulation est relativement coûteuse en temps de calcul, pouvant atteindre plusieurs jours sur quelques dizaines de processeurs [2, 12]. Ce temps de calcul peut donc devenir prohibitif lorsque qu'il est envisagé de réaliser plusieurs dizaines de simulations, par exemple dans le cadre d'études paramétriques.

Pour limiter les coûts et rendre accessible la planification de nombreuses simulations, nous nous intéressons ici à la construction d'un **modèle mathématique rapide à évaluer pour étudier la fissuration locale**. Il existe plusieurs travaux dans la littérature portant sur le développement d'outils de machine learning [18] pour l'analyse de données de fissuration.

Ils concernent notamment des problèmes de classification (détection automatique de l'apparition de fissure et du mode de fissuration) [19, 20, 21] ou d'estimation de paramètres de rupture (énergie de rupture et ténacité) [22, 23]. Dans ce manuscrit, nous nous concentrerons sur la prédiction de chemins de fissure, au sens topologique. Ce sujet a été étudié dans [24, 25, 26] mais aucune de ces contributions n'a conduit à la mise en place d'un métamodèle permettant de construire de proche en proche la trajectoire d'une fissure à partir d'informations locales et d'associer une incertitude à cette construction. Ceci constitue l'originalité des développements proposés dans cette thèse. D'un point de vue pratique, l'avantage principal du nouveau modèle est la réduction drastique du temps calcul pour l'obtention du chemin de fissuration complet ou pour identifier les zones d'intérêts de fissuration dans le but de raffiner localement un maillage.

La construction du nouveau modèle probabiliste s'articule autour des deux problématiques suivantes :

- Quels sont les descripteurs pertinents pour caractériser localement un chemin de fissuration ?
- Quel modèle mathématique tenant compte de plusieurs variables ou indicateurs est le plus adapté pour reproduire un chemin de fissuration ?

Pour traiter ces deux problématiques, il sera important d'intégrer des considérations mécaniques dans le développement du modèle. Pour y parvenir, des analyses sur le comportement du béton réel mais également sur les simulations numériques de fissure seront effectuées.

Ce manuscrit comporte 4 chapitres principaux :

- **Le chapitre 1** décrit la nature du béton et les principaux mécanismes de propagation d'une fissure. L'objectif est de définir un socle d'hypothèses mécaniques à intégrer au modèle afin qu'il reproduise le plus fidèlement possible les phénomènes expérimentaux. Par ailleurs, la méthode des modèles cohésifs utilisée par XPER, est présentée afin d'illustrer sa précision mais également sa complexité à l'origine d'un temps de calcul coûteux. Ce chapitre se conclut en présentant la motivation et la démarche de la modélisation retenue dans ce travail avec un rappel sur les outils mathématiques qui seront utilisés.
- **Le chapitre 2** présente une réponse aux deux problématiques listées précédemment.

demment en proposant la construction d'un modèle de nature probabiliste intégrant des indicateurs caractéristiques de la fissuration. Le développement du modèle probabiliste est basé sur une analyse fine des processus de fissuration en lien avec les spécificités du béton (vu ici comme un composite matrice/inclusions à inclusions tenaces et interfaces faibles) et sur l'analyse des résultats numériques obtenus à l'aide du code XPER. Ce modèle est intégré dans un algorithme de propagation de fissure qui détermine rapidement les chemins locaux les plus probables pour la trajectoire de la fissure. Ainsi, à partir d'une microstructure donnée, il est possible de prédire le chemin de fissuration à partir d'une discréétisation de la microstructure, la pointe de fissure et la direction principale de propagation (le mode de fissuration).

- **Le chapitre 3** porte sur la vérification et la validation du modèle dans une situation où la direction locale de propagation de la fissure est connue *a priori*. Après l'estimation des paramètres du modèle à partir d'une base d'apprentissage, les performances du modèle sont analysées pour plusieurs critères d'intérêt. L'influence de l'ensemble d'apprentissage est également étudiée.
- **Le dernier chapitre** est consacré à l'application du modèle sur une expérience classique dans le domaine des matériaux cimentaires, une poutre en flexion trois points. La mise en œuvre de cette étude nécessite le couplage avec un code mécanique Eléments Finis afin de déterminer localement la direction de propagation de fissure. Le chemin de fissure obtenu à l'aide du modèle probabiliste couplé est comparé à celui obtenu avec XPER.

Chapitre 1

État de l'art : fissuration du béton et méthodes statistiques

Introduction

Ce chapitre est dédié à plusieurs rappels en mécanique et en statistique qui sont exploités dans la suite de ce travail.

La première partie concerne la présentation du béton et des pathologies pouvant engendrer une fissuration du matériau. L'objectif de cette étude bibliographique est de définir, à partir de considérations physiques, un socle d'hypothèses sur lequel va s'appuyer le modèle de prédiction de fissure développé au Chapitre 2. Par la suite, le fonctionnement du logiciel XPER est présenté afin d'illustrer la précision des faciès de rupture qu'il est possible d'obtenir mais au prix d'un coût de calcul conséquent. Enfin, les outils statistiques pouvant être mis en œuvre dans une stratégie de diminution des coûts de calcul sont décrits.

1.1 Le béton

Le béton est un matériau composite constitué de trois phases : granulat, pâte de ciment et sable [27].

Les granulats confèrent au béton sa résistance mécanique. Le ciment est le composé liant du béton.

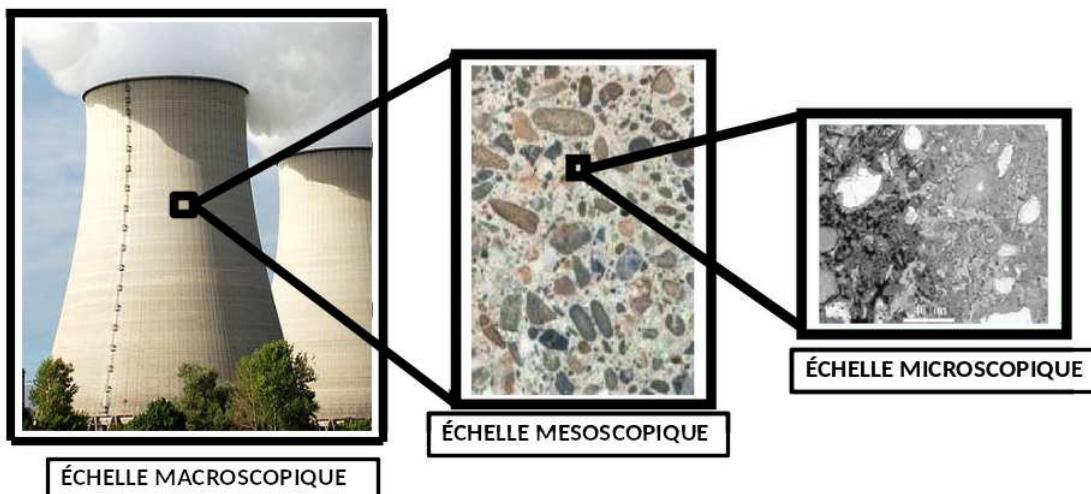


FIGURE 1.1 – Les principales échelles du béton [1]

La présente étude se place à l'échelle mésoscopique, échelle des granulats (Figure 1.1). À cette échelle, le matériau peut être considéré comme un bi-matériau composé d'une matrice en mortier (ciment et sable) et d'inclusions (granulats).

1.1.1 Quelques pathologies affectant le béton

Le béton peut être affecté par des attaques physiques et chimiques subies par les structures au cours du temps [28]. Parmi les différentes pathologies existantes, on peut citer :

1. **L'alcali-réaction** [29] : la silice de certains types de granulats réagit avec le ciment (composé alcalin) formant un gel qui gonfle à l'intérieur du béton et pouvant potentiellement le fissurer,
2. **Le retrait** [30] : il existe différents types de retraits et à divers stades de la vie du béton engendrant une réduction du volume du béton par réaction chimique. Par exemple, le retrait de séchage se développe dans le béton au cours de son durcissement, pendant les premiers mois. Il est plus important en surface qu'au cœur des structures en béton. En effet, il est causé par l'évaporation de l'eau contenue dans la porosité du béton, à partir des surfaces libres soumises à l'air ambiant ayant un degré d'humidité inférieur à celui du béton,
3. **La RSI (Réaction Sulfatique Interne)** [31, 2] : cette réaction est due à la formation différée d'une espèce chimique appelée l'ettringite (espèce minérale composée de sulfate de calcium et d'aluminium hy-

draté), plusieurs mois voire plusieurs années après la prise du ciment (Figure 1.2).

Ces dégradations conduisent généralement au développement d'un réseau de fissures [32, 33] plutôt localisé dans les zones d'humidité élevée [34]. L'ouverture des fissures peut varier de quelques dixièmes de millimètres à quelques millimètres. Elles influencent considérablement la tenue des structures en les fragilisant et en augmentant leurs perméabilités. Connaître les caractéristiques de la fissuration, en particulier le faciès de rupture, est donc essentiel dans l'étude du prolongement de la durée de vie d'exploitation des centrales nucléaires.



FIGURE 1.2 – Exemple d'une dégradation du béton (RSI) [2]

1.1.2 La phénoménologie de la fissuration

Le béton, dont les propriétés mécaniques dépendent en particulier de sa composition, est souvent considéré comme élastique quasi-fragile [35, 36, 7]. Il est clairement établi que les granulats ont une influence primordiale sur le faciès de rupture [37]. Cette influence est due d'une part à une forte résistance à la rupture des granulats et d'autre part à la relative faiblesse des interfaces granulat/matrice. Les propriétés d'interface dépendent d'une auroreole autour des granulats appelée zone de transition (ITZ pour Interfacial Transition Zone) [38, 39]) (voir Figure 1.3).

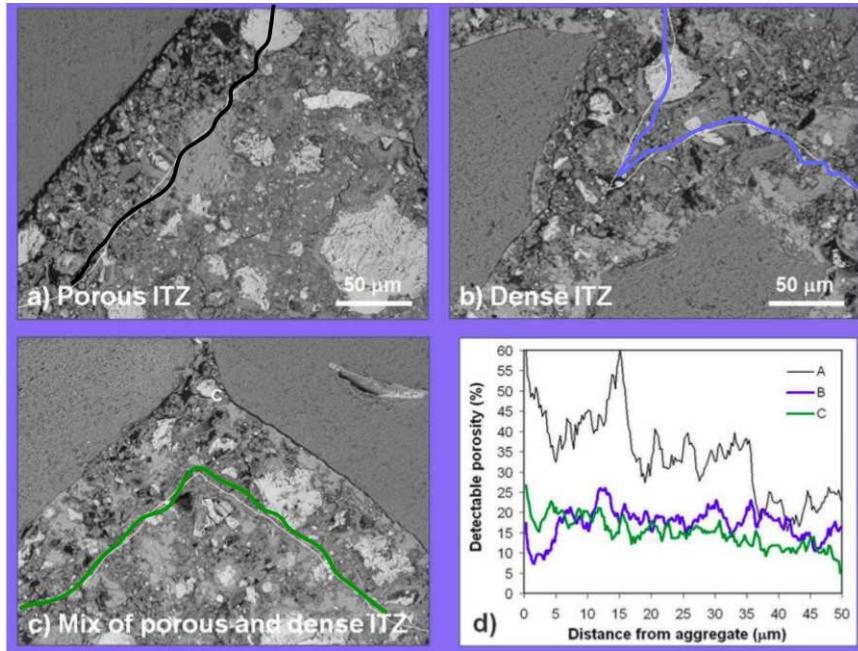


FIGURE 1.3 – Porosité de l’ITZ [1]

Cette zone est très poreuse, réduisant de fait sa résistance à la rupture. Ainsi, les fissures, lors de leur propagation, contournent préférentiellement les granulats [40, 41, 42] (voir Figure 1.4).

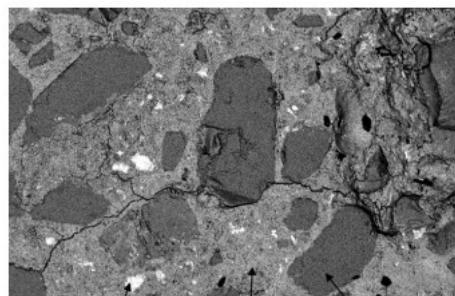


FIGURE 1.4 – Faciès de rupture : les fissures contournent les granulats [3]

Il est établi que les granulats et leurs frontières ont une influence significative sur le comportement mécanique du béton [43]. En effet, selon Husem [44], la résistance en compression d’un béton dépend pour 21% de la pâte de ciment, pour 12% des granulats et 67% de l’interphase. Pour résumer, la présence des granulats entraîne [45, 46] :

- une hétérogénéité des champs mécaniques locaux,
- un accroissement des zones de faiblesses (interfaces granulats/matrice) qui constituent localement des zones privilégiées de fissuration.

1.1.3 Hypothèses de travail

L'analyse du comportement de la fissure dans le béton permet d'établir quatre hypothèses de travail :

- (H1) la matrice est élastique fragile,
- (H2) les granulats sont élastiques et très tenaces (incassables),
- (H3) l'interface matrice-granulats est faible,
- (H4) la fissure se propage dans un demi-plan orienté selon la direction locale de propagation, en avant de la pointe de fissure [47]

1.1.4 Simulation numérique à l'aide des Modèles de Zones Cohésives

Le concept de Modèles de Zones Cohésives(MZC), introduit par [48] et [49], considère une séparation surfacique dans une process zone (appelée aussi fracture process zone) en pointe de fissure (Figure 1.5). Dans le cas des

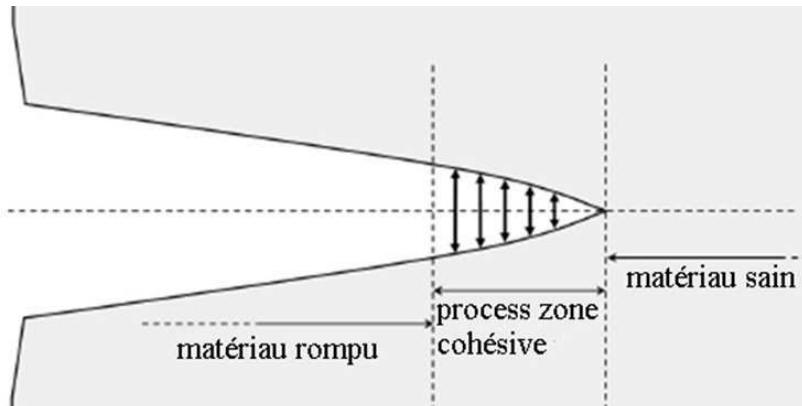


FIGURE 1.5 – Principe d'une zone cohésive [4]

matériaux quasi-fragiles comme le béton, la "process zone" désigne la zone dans laquelle le matériau subit des dommages de tailles non négligeables par rapport aux dimensions de la structure considérée [4]. Les modèles cohésifs reposent sur l'hypothèse que la "process zone" peut être décrite comme une interface fictive le long de laquelle le champ de déplacement peut admettre des discontinuités, tout en transmettant des efforts. Cette "process zone" cohésive constitue alors une zone de transition entre le matériau sain et le matériau rompu.

Quand les surfaces, appelées surfaces cohésives, se séparent, la contrainte cohésive augmente jusqu'à une valeur maximale, puis diminue ensuite jusqu'à zéro, correspondant à une fissure locale. L'aire sous la courbe contrainte-déplacement est égale à l'énergie nécessaire à la séparation et correspond dans des cas particuliers à l'énergie de Griffith [50, 51]. Le comportement du matériau est découplé en une partie volumique durcissante décrivant le comportement sans endommagement et un comportement surfacique adoucissant décrivant la fissuration. La modélisation repose sur l'approche Non Smooth Contact Dynamics (NSCD) [15] dédiée au traitement de systèmes dynamiques en présence de contraintes unilatérales sans régularisation ni pénalisation[52, 13].

Un modèle de comportement surfacique relie le vecteur contrainte d'adhésion $\underline{R}^{adh} \in \mathbb{R}^{N^d}$ au saut de déplacement $[\underline{u}] \in \mathbb{R}^{N^d}$ par un tenseur d'élasticité surfacique endommageable $\underline{\underline{K}}(\beta) \in R^{N^d \times N^d}$. Il traduit l'effort qu'il faut fournir pour ouvrir les lèvres de fissure en train de se créer d'une certaine ouverture $[\underline{u}]$:

$$\underline{R}^{adh} = \underline{\underline{K}}(\beta) \cdot [\underline{u}]$$

où $\beta \in [0, 1]$ représente l'endommagement surfacique ($\beta = 1$ lorsque l'interface est saine, $\beta = 0$ lorsque l'interface est rompue). $\underline{\underline{K}}(\beta)$ est un tenseur de deuxième ordre traduisant l'adoucissement progressif du comportement surfacique lors d'une fissuration.

Les phénomènes post-ruptures sont décrits par des conditions de Signorini-Coulomb [51, 53, 54, 55].

Le vecteur de saut de déplacement ainsi que la contrainte adhésive sont décrits dans le repère local de la fissure en cours de création($\underline{n}, \underline{t}, \underline{s}$) où $(\underline{t}, \underline{s})$ définissent le plan de fissuration (voir Figure 1.6) :

$$[\underline{u}] = [u_n]\underline{n} + [u_t]\underline{t} + [u_s]\underline{s} = [u_n]\underline{n} + [\underline{u}_{ts}]$$

$$[\underline{R}] = [R_n]\underline{n} + [R_t]\underline{t} + [R_s]\underline{s} = [R_n]\underline{n} + [\underline{R}_{ts}]$$

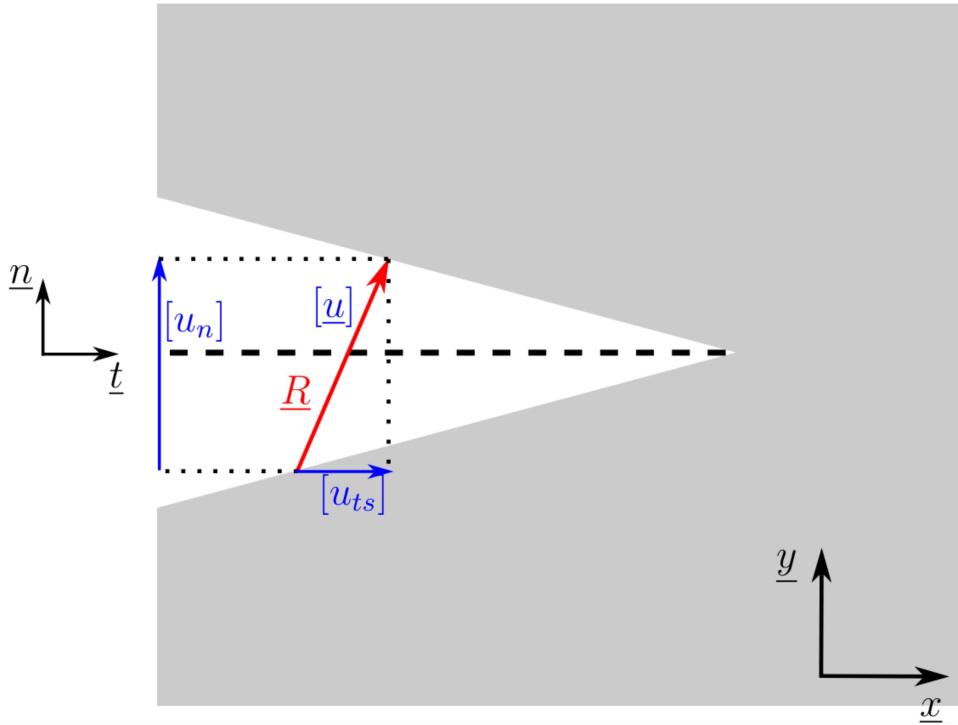


FIGURE 1.6 – Schéma représentant la relation locale entre la contrainte cohésive et le saut de déplacement [2]

Sur la Figure 1.7, la contrainte σ_{mI} correspond au saut de déplacement critique $[u^c]$ c'est à dire que l'interface est endommagée. L'interface est rompue à la valeur du saut de déplacement à rupture $[u^r]$.

L'évolution de la variable d'endommagement surfacique en fonction de l'ouverture de fissure est décrite par la loi suivante :

$$\beta = \min(g(\|[\underline{u}]\|), g(\|[\underline{u}]\|_{max}))$$

où $\|[\underline{u}_{max}]\|$ est la plus grande valeur précédemment atteinte par le saut de déplacement et g une fonction décroissante de $\|[\underline{u}]\|$ égale à :

$$g(x) = \begin{cases} \beta_0 & \text{si } x \leq \delta_0, \\ \beta_0 \frac{\delta_0}{x} \left(1 - \left(\frac{x-\delta_0}{\delta_c-\delta_0}\right)^2\right) & \text{si } \delta_0 < x < \delta_c, \\ 0 & \text{si } x \geq \delta_c, \end{cases}$$

avec $\delta_0 = \frac{R_{max}}{2} \left(\frac{1}{C_N} + \frac{1}{C_T} \right)$, $\delta_c = \frac{3}{2} \left(\frac{w}{R_{max}} + \frac{\delta_0}{6} \right)$, C_N et C_T des raideurs initiales interfaciales (modèle intrinsèque) (Pa/m), $0 \leq \beta_0 \leq 1$ un niveau d'endommagement surfacique initial, w une énergie de référence (J/m^2), R_{max} est la valeur maximale atteinte par la réaction adhésive (MPa).

Les paramètres C_N et C_T sont des paramètres numériques reliés à la taille de maille [56] et w et R_{max} sont des paramètres matériaux.

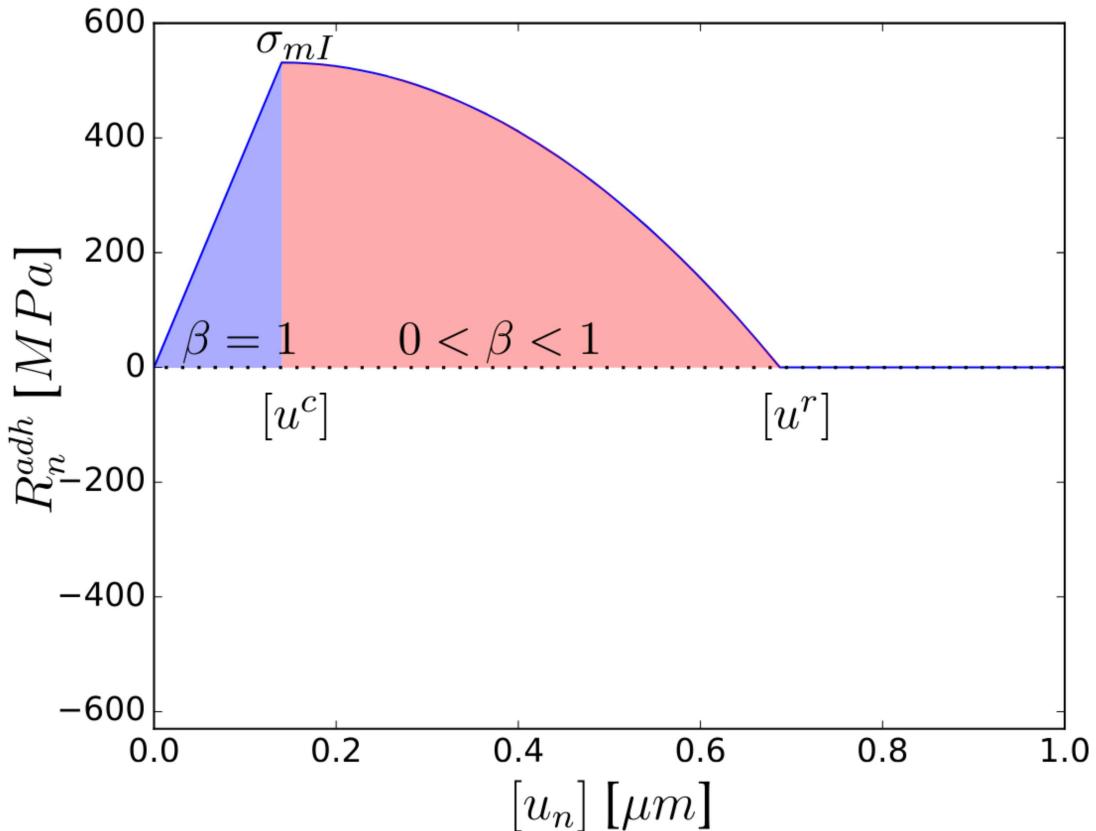


FIGURE 1.7 – Courbe contrainte normale d’adhésion en fonction du saut de déplacement normal. En bleu, le comportement avant l’endommagement surfacique. En rouge, l’interface lorsque la fissure a commencé à se créer [2]

Ainsi, la plateforme numérique associée XPER (eXtended cohesive zone models and PERiodic homogenization) permet de simuler en trois dimensions la rupture dynamique de matériaux hétérogènes de l’initiation jusqu’à la ruine des structures ainsi que des interactions complexes post-ruptures [16]. Le logiciel est parallélisé par une méthode de décomposition de domaines.

La résolution incorpore donc une physique de fissuration riche mais au détriment d’un temps de calcul conséquent. Plusieurs semaines sur plusieurs processeurs peuvent ainsi être nécessaires pour estimer le faciès de rupture d’une structure en béton dans laquelle la fissure rencontre quelques dizaines de granulats.

1.1.5 Exemples de simulations XPER sur un béton numérique

Dans ce mémoire, plusieurs formes de granulats sont considérées : carré, triangle, pentagone et octogone. La fraction volumique de granulats est fixée à 25%. Dans cette section, deux microstructures sont générées (Figure 1.8) et permettent d'illustrer les résultats obtenus par XPER.

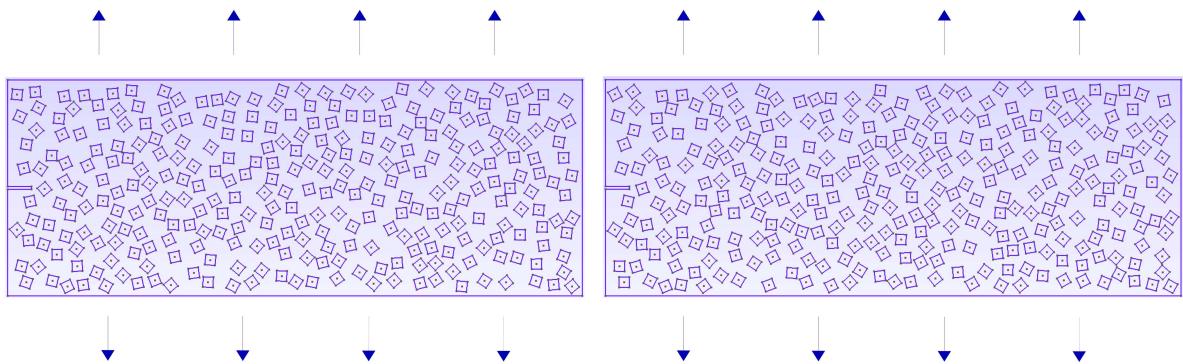


FIGURE 1.8 – Exemples de microstructures générées avec des granulats carrés (VER-5 à droite et VER-33 à gauche)

Pour ces simulations, on considère que la matrice est élastique fragile avec des inclusions élastiques ne pouvant pas se fissurer. Une préfissure est présente sur le bord gauche et la structure soumise à un effort de traction perpendiculaire à cette fissure (la fissure se propage donc macroscopiquement en mode I). L'ensemble des paramètres matériaux et géométriques de l'étude sont fournis dans la Table 1.1 et la Table 1.2.

	Matrice	granulats
ρ (kg/m ³)	2900	2900
E (Pa)	12×10^9	60×10^9
ν	0.2	0.2

TABLE 1.1 – Paramètres volumiques

	Matrice-Matrice	granulats-granulats	Matrice-granulats
$C_N = C_T$ (Pa/m)	1×10^{17}	1×10^{17}	1×10^{17}
σ_0 (Pa)	4.6×10^7	2.4×10^9	1.4×10^7
w (J/m ²)	20	$\simeq \infty$	20

TABLE 1.2 – Paramètres surfaciques

Une illustration du maillage obtenu est donnée sur la Figure 1.9.

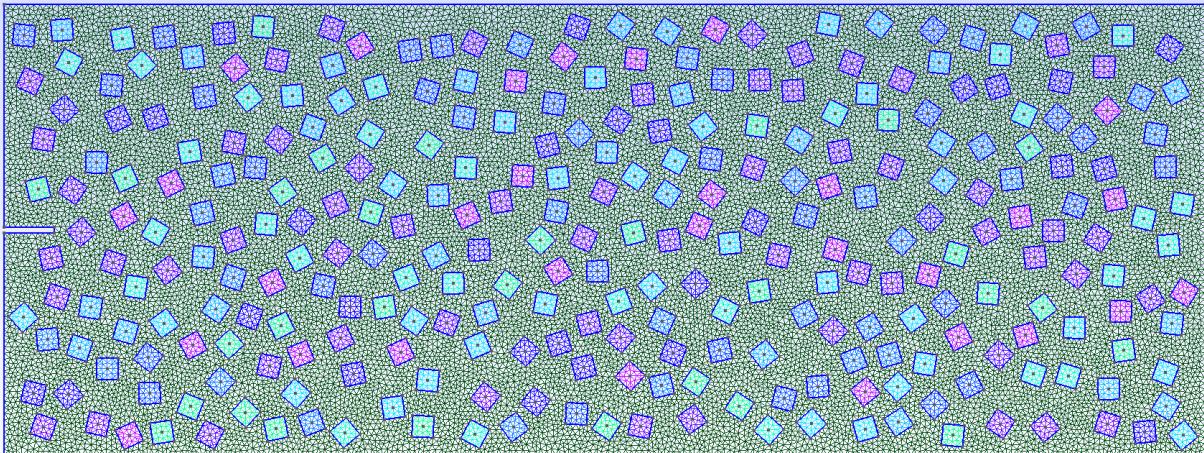


FIGURE 1.9 – Maillage du VER 5

La Figure 1.10 montre les faciès de rupture obtenus pour les microstructures de la Figure 1.8.

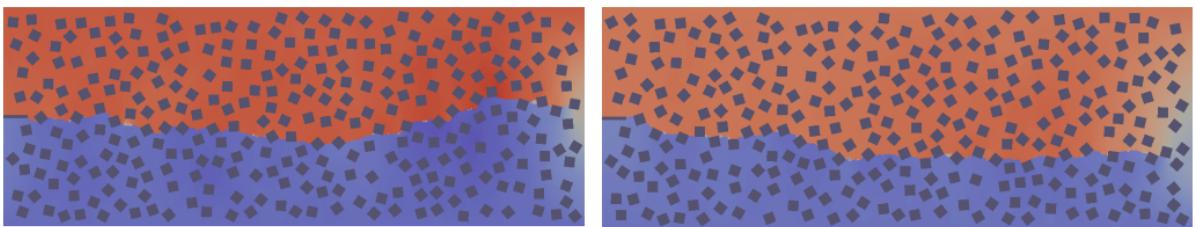


FIGURE 1.10 – Faciès de rupture pour les deux microstructures de la Figure 1.8 (VER-5 à droite et VER-33 à gauche) : rouge, déplacement vers le haut ; bleu, déplacement vers le bas

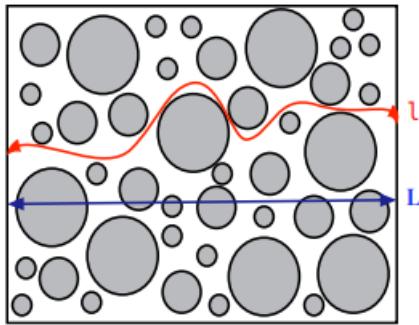
La fissure se propage préférentiellement dans la matrice et contourne les granulats, ce qui est en accord avec les observations expérimentales validant les hypothèses de la section 1.1.3.

On s'intéresse ici à une grandeur d'intérêt mécanique globale caractérisant une partie de la complexité du chemin de fissuration : la tortuosité (Figure 1.11).

Définition 1.1.1. Tortuosité : la tortuosité τ d'une fissure est le rapport entre la longueur de la fissure et L la longueur projetée perpendiculairement à la direction principale de propagation : $\tau = \frac{l}{L}$.

Les valeurs des tortuosités pour les deux faciès de la Figure 1.10 sont :

$$\begin{cases} \tau = 1.17 \text{ pour VER-33} \\ \tau = 1.13 \text{ pour VER-5} \end{cases}$$



$$\text{Tortuosité en 2D : } \tau = \frac{l}{L}$$

FIGURE 1.11 – Tortuosité, $\tau = \frac{l}{L}$ [1]

La Table 1.3 indique le temps CPU total pour générer le faciès d'une microstructure. Le temps CPU correspond au produit entre le nombre de processeurs et le temps de calcul (ici 44h pour 24 processeurs).

Aire de la microstructure	$0.6 \times 0.225 \text{ m}^2$
Rayon des granulats	0.06
Nombre de mailles	48666
Nombre de processeurs	24
Temps CPU total	1056h

TABLE 1.3 – Paramètres numériques et temps de calcul pour des processeurs de type : Intel(R) Xeon(R) Gold 6126 CPU @ 2.60GHz connectés en Infiniband - 256Go RAM - Noeuds de 24procs.

Comme indiqué précédemment, les simulations sont coûteuses en terme de temps de calcul. Ce facteur est limitant lorsqu'il est envisagé de réaliser un grand nombre de simulations ou encore dans l'étude de microstructures de grandes tailles. Pour palier cette difficulté, une stratégie de réduction du coût de calcul est mise en œuvre dans la section suivante.

1.2 Une stratégie de réduction du coût de calcul

L'objectif dans cette section est de présenter une stratégie pour parvenir à une bonne estimation du faciès de fissure d'une microstructure donnée et des quantités mécaniques associées dans un temps de calcul réduit.

Pour cela, nous proposons de développer un outil rapide à évaluer et permettant de prédire avec un certain degré de confiance la trajectoire d'une

fissure dans une microstructure comportant une pré-fissure à l'échelle d'une collection de granulats.

1.2.1 Limitation actuelle et indicateurs locaux

Les descripteurs microstructuraux usuels sont majoritairement dédiés aux microstructures périodiques ou aléatoires. Pour les milieux aléatoires, on peut en particulier citer :

- a) les moments à n points d'appuis comme la covariance spatiale [10, 1] permettant de caractériser les agencements spatiaux de différentes phases en présence,
- b) les fonctions de distribution spatiales de points telles que la fonction K de Ripley [57, 58] permettant de décrire le degré d'agencement des centres des inclusions dans le cas des milieux de type matrice-inclusions.

Pour le cas des milieux aléatoires qui concernent ce travail, l'utilisation pratique de ces indicateurs microstructuraux requiert des propriétés de stationnarité et d'ergodicité. Cependant la macrofissuration de tels milieux induit une microstructure locale (la fissure) dont l'évolution spatiale n'est pas stationnaire en milieu hétérogène. Sur la Figure 1.12, deux microstructures avec des descripteurs morphologiques en commun (covarigramme, fraction volumique, etc.) ne permet donc pas d'obtenir une équivalence en fissuration.

Aussi pour prendre en compte ce caractère local, il a été choisi de construire un modèle probabiliste de prédiction de chemin de fissure reproduisant la trajectoire point par point. Plus précisément, l'objectif est de disposer d'un modèle permettant, à partir d'une pointe de fissure, de déterminer les prochains points candidats les plus probables pour la propagation de la fissure en prenant en compte les valeurs d'indicateurs locaux associés à leur position relative par rapport à la pointe de fissure.

Dans ce travail, la construction du modèle s'appuie sur les chaînes de Markov, dont les bases sont rappelées dans la section suivante. Les chaînes de Markov permettent de déterminer à partir d'un lot d'informations bien sélectionnées la transition d'un état à un autre sans prendre en compte les événements passés. Elles se prêtent donc particulièrement bien à l'étude de la fissure dont l'avancement est supposé dépendre d'informations locales récupérées en pointe de fissure et non de sa trajectoire en amont.

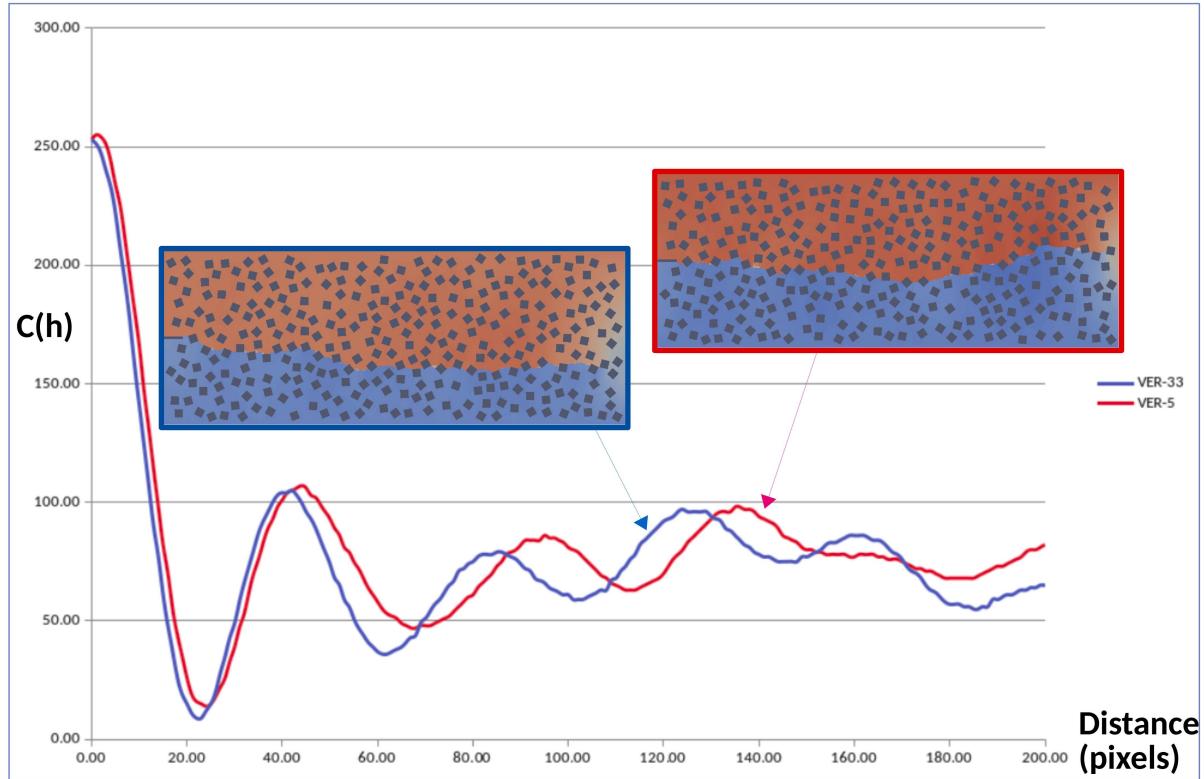


FIGURE 1.12 – Covariogrammes associés aux deux microstructures de la Figure 1.10

1.2.2 Rappel sur les chaînes de Markov

Ce type de modélisation est très répandue dans la littérature [59] et a été appliquée sur des problèmes de discrimination dans des domaines très variés tels que le milieu médical [60] par exemple (prédition du passage d'un état sain à un état migraineux chez un patient à partir de l'observation d'indicateurs de santé) ou l'hydrologie [61] (prédition de la qualité des nappes phréatiques sur la base d'indicateurs de qualité de la terre dans la région étudiée).

Définition d'une chaîne de Markov

Une chaîne de Markov est une suite de variables aléatoires $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ qui permet de modéliser l'évolution dynamique d'un système aléatoire : X_n représente l'état du système à l'instant n . La propriété fondamentale des chaînes de Markov, dite propriété de Markov, est que son évolution future ne dépend du passé qu'au travers de sa valeur actuelle.

Définition 1.2.1. *Une suite $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de variables aléatoires à valeurs dans un ensemble au plus dénombrable \mathcal{E} est une chaîne de Markov d'espace d'états \mathcal{E} si et seulement si $\forall k \in \mathbb{N}, \forall (x_0, \dots, x_{k+1}) \in \mathcal{E}^{k+2}$ tels que $P(X_0 =$*

$x_0, \dots, X_k = x_k) > 0,$

$$P(X_{k+1} = x_{k+1} | X_0 = x_0, \dots, X_k = x_k) = P(X_{k+1} = x_{k+1} | X_k = x_k)$$

où $\forall (x, y) \in \mathcal{E}^2$, $P(X_{k+1} = y | X_k = x)$ est la probabilité de transition pour aller de l'état x à l'état y .

La chaîne est dite homogène si on a de plus $\forall k \in \mathbb{N}$ et $\forall (x, y) \in \mathcal{E}^2$, $P(X_{k+1} = y | X_k = x) = P(X_1 = y | X_0 = x)$.

Si ν_0 désigne la loi de X_0 ($\nu_0(x_0) = P(X_0 = x_0)$), on a alors $\forall (x_0, \dots, x_n) \in \mathcal{E}^{n+1}$,

$$P(X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) = \nu_0(x_0) \prod_{k=0}^{n-1} P(X_{k+1} = x_{k+1} | X_k = x_k)$$

Estimation de la probabilité de transition

En pratique, la probabilité de transition s'exprime sous la forme d'une loi paramétrique T dite de transition i.e. pour une chaîne homogène, $\forall (x, y) \in \mathcal{E}^2$, $P(X_{k+1} = y | X_k = x) = T_\Lambda(x, y)$ où Λ est un vecteur de paramètres.

Si $(x_0, \dots, x_{M-1}) \in \mathcal{E}^M$ désigne M observations, le vecteur de paramètres est estimé par maximisation de la vraisemblance [62], l'estimateur Λ^* vérifie :

$$\begin{aligned} \Lambda^* &= \arg \max_{\Lambda} P(X_0 = x_0, \dots, X_{M-1} = x_{M-1}), \\ &= \arg \max_{\Lambda} \{\prod_{k=0}^{M-2} P(X_{k+1} = x_{k+1} | X_k = x_k)\}, \\ &= \arg \max_{\Lambda} \{\prod_{k=0}^{M-2} T_\Lambda(x_k, x_{k+1})\}. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Méthode d'optimisation

Il existe plusieurs méthodes pour résoudre un problème d'optimisation en fonction de sa complexité. On se concentre ici sur des techniques pour traiter des problèmes faisant intervenir une fonction à optimiser dont les dérivées sont difficiles à évaluer. Pour contourner cette difficulté, plusieurs approches ne nécessitant pas un calcul exact des dérivées ont été introduites. De façon non exhaustive, on peut mentionner la méthode de Nelder

et Mead [63] qui se base sur des opérations sur un simplexe. On trouve également des méthodes qui utilisent un modèle pour approcher la fonction objectif dans une région de confiance [64, 65, 66].

Dans notre travail, nous exploitons la méthode de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) [67] qui permet de résoudre un problème d'optimisation non linéaire sans contraintes en évitant d'avoir à construire explicitement la matrice hessienne. Elle est rappelée dans la suite.

Soit le problème de minimisation suivant :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} g(x) \text{ où } g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}, d \geq 1$$

En posant $f(x) = \nabla g(x)$ et $H(x) = \nabla^2 g(x)$, x^* est un minimum local de g si $f(x^*) = 0$ et $H(x^*) \geq 0$ (hessien semi-défini positif). On est donc ramené à un problème de recherche de racine de f sous contrainte. La méthode BFGS s'appuie alors sur l'utilisation de la méthode de quasi-Newton en intégrant une approximation de la matrice hessienne garantissant la contrainte.

Les méthodes de Newton et quasi-Newton permettent d'approcher les racines de la fonction f . Elles consistent à linéariser f à partir d'un développement de Taylor à l'ordre 1 en $x_k \in \mathbb{R}^d$. Avec les notations précédentes, la partie linéaire s'écrit :

$$\tilde{f}_k(x) = f(x_k) + H_k(x - x_k) \quad (1.2)$$

où H_k est la matrice hessienne de g . On cherche alors à résoudre l'équation $\tilde{f}_k(x) = 0$ qui est équivalente à $f(x_k) + H_k(x - x_k) = 0$.

Chacune des méthodes est itérative en résolvant $x_{k+1} = x_k - H_k^{-1}f(x_k)$ jusqu'à atteindre une condition d'arrêt définie par un seuil de tolérance. La différence entre les deux méthodes se situe dans le calcul de H_k (et donc de son inverse) : la méthode de Newton requiert un calcul explicite de H_k à chaque itération alors que la méthode de quasi-Newton se base sur une approximation de H_k . Cette seconde méthode présente donc l'avantage de ne pas passer par le calcul explicite du gradient qui peut parfois se révéler complexe et coûteux.

Cette approximation est réalisée par la méthode de Broyden où la matrice H_k est obtenue à partir de la matrice H_{k-1} de l'itération précédente. Les

matrices H_{k-1} et H_k doivent être « proches » au sens de la norme matricielle. En considèrent le modèle linéaire (1.2) en x_k et en x_{k-1} , on a :

$$f(x_k) - f(x_{k-1}) = H_k(x_k - x_{k-1})$$

L'approximation de H_k doit donc vérifier :

$$y_{k-1} = H_k d_{k-1}$$

avec $d_{k-1} = x_k - x_{k-1}$ et $y_{k-1} = f(x_k) - f(x_{k-1})$

On obtient ici l'équation de la sécante entre x_{k-1} et x_k . Or il existe une infinité de matrices H_k vérifiant l'équation de la sécante. La solution optimale est obtenue par la formule de Broyden :

Formule de Broyden *L'écart entre les modèles \tilde{f}_{k-1} et $\tilde{f}_k(x)$ est minimal en choisissant H_k solution de $\min_{A \in \mathbb{R}^{d \times d}} \|A - H_{k-1}\|$ sous la condition $y_{k-1} = Ad_{k-1}$ avec $d_{k-1} = x_k - x_{k-1}$ et $y_{k-1} = f(x_k) - f(x_{k-1})$. La solution optimale est la suivante :*

$$H_k = H_{k-1} + \frac{(y_{k-1} - H_{k-1}d_{k-1})d_{k-1}^T}{d_{k-1}^T d_{k-1}}$$

où d_{k-1}^T est le transposée du vecteur d_{k-1} .

Remarque 1.2.1. *Les méthodes de quasi-Newton et de Newton peuvent converger vers des solutions différentes.*

La méthode de quasi-Newton converge généralement moins vite que la méthode de Newton, mais nécessite beaucoup moins d'appels de la fonction f car il n'y a pas de calcul de gradient.

Toutefois, la formule de Broyden ne garantit pas que H_k soit symétrique et définie positive, conditions pour déterminer un minimum. La formule de BFGS issue de celle de Broyden, par une démonstration basée sur la récurrence, permet de construire H_k symétrique définie positive :

Formule de BFGS

$$H_k = H_{k-1} + \frac{y_{k-1} y_{k-1}^T}{y_{k-1}^T d_{k-1}} - \frac{H_{k-1} d_{k-1} d_{k-1}^T H_{k-1}}{d_{k-1}^T H_{k-1} d_{k-1}}$$

avec $d_{k-1} = x_k - x_{k-1}$ et $y_{k-1} = f(x_k) - f(x_{k-1})$. H_k^{-1} se déduit alors de la formule précédente :

$$H_k^{-1} = \left(I - \frac{d_{k-1} y_{k-1}^T}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \right) H_{k-1}^{-1} \left(I - \frac{y_{k-1} d_{k-1}^T}{d_{k-1}^T y_{k-1}} \right) + \frac{d_{k-1} d_{k-1}^T}{d_{k-1}^T y_{k-1}}$$

si $d_{k-1} y_{k-1}^T > 0$ avec $d_{k-1} = x_k - x_{k-1}$ et $y_{k-1} = f(x_k) - f(x_{k-1})$.

En pratique, une version optimisée de cet algorithme appelée L-BFGS (Limited Memory Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno) est utilisée. Limited-Memory se rapporte à la méthode de stockage lors de l'exécution de l'algorithme. L'utilisation simple de BFGS stocke une approximation dense $d \times d$ de l'inverse de Hessienne alors que L-BFGS ne stocke que quelques vecteurs qui représentent implicitement l'approximation. La méthode L-BFGS est particulièrement adaptée aux problèmes d'optimisation avec de nombreuses variables à estimer.

Conclusion

Ce premier chapitre a permis d'établir l'objectif de ce travail : la mise en place d'un modèle probabiliste capable de réaliser rapidement des prédictions de chemins de fissures dans un béton numérique. Les motivations sont multiples :

- disposer d'un outil de prédiction peu coûteux en temps de calcul tout en conservant une bonne précision,
- pouvoir caractériser la tortuosité ou les chemins de fissuration possibles pour déterminer des microstructures équivalentes au sens de la fissuration.

Plusieurs rappels au niveau mécanique et statistique ont été réalisés afin de disposer des outils nécessaires pour la mise en place du modèle. De plus, le comportement de la fissure dans le béton a été analysé. Cette analyse a conduit à la définition d'un ensemble d'hypothèses mécaniques mais permettra également, dans un second temps, de définir des indicateurs de fissuration.

Ces aspects mécaniques seront intégrés au modèle afin qu'il soit le plus fidèle possible aux phénomènes expérimentaux. Enfin, la stratégie de modélisation a été introduite et repose sur l'utilisation de chaînes de Markov. Le prochain chapitre a pour but de présenter la construction du modèle, les indicateurs associés ainsi que l'algorithme d'estimation des chemins de fissure.

Chapitre 2

Modèle de prédiction du trajet de fissure

Introduction

Ce chapitre est consacré à la description d'un modèle rapide de prédiction du trajet d'une fissure au sein d'une microstructure granulaire. Sa construction se fait en deux étapes. La première consiste à définir plusieurs indicateurs géométriques apportant des informations sur le comportement local de la fissure. La seconde est le développement d'un modèle probabiliste intégrant ces indicateurs et permettant de prédire de proche en proche la trajectoire.

Dans la section 2.1, on présente plusieurs notions importantes afin de respecter les hypothèses (section 1.1.3) du comportement local d'une fissure. Les deux étapes de la construction du modèle de prédiction sont ensuite décrites dans les sections 2.2 et 2.3. Enfin, la section 2.4 est dédiée à la procédure de prédiction sur la base du nouveau modèle.

2.1 Représentation de la microstructure et propagation de la fissure

Lors de sa progression, la fissure se propage en fonction de la disposition locale des granulats qui peuvent être interprétés comme des obstacles à contourner [68]. Comme la trajectoire de la fissure est prédictive de proche en proche, la discrétisation de l'espace à cette fin est primordiale. Dans

ce travail, les granulats sont approchés par des polygones. Chaque coté du polygone est discrétisé avec 5 points soit un total de 16 points dans le cas d'un granulat carré (Figure 2.1). Aucun point de discrétisation n'est introduit dans la matrice entre deux granulats. En d'autres termes, une fissure ne peut se propager qu'en ligne droite entre deux granulats ou suivre les bords des granulats (Hypothèse (H3) de la section 1.1.3). Pour une microstructure E , l'ensemble des points de discrétisation des granulats noté $\mathcal{Y}_E = \{y_i^E\}_{i=1,\dots,N_E}$ constitue alors la microstructure granulaire discrète et la trajectoire de la fissure est décrite par un sous-ensemble de \mathcal{Y}_E noté $\mathcal{X}_E = \{x_i^E\}_{i=1,\dots,m_E}$.

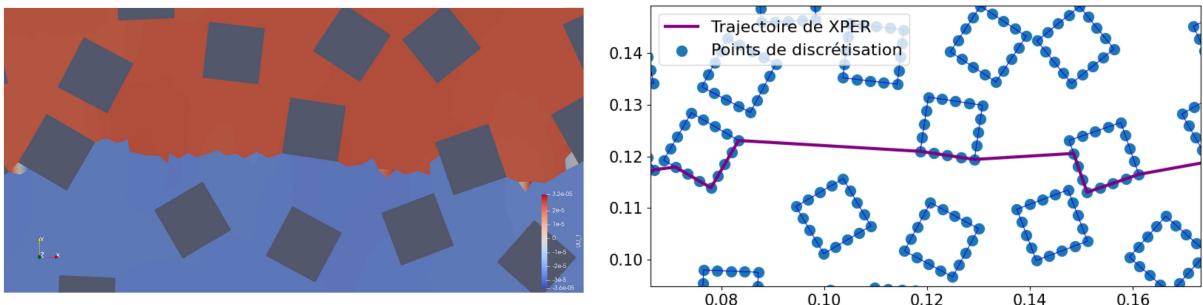


FIGURE 2.1 – Simulation XPER d'un trajet de fissure (gauche), microstructure granulaire discrète et approximation de la fissure associée (droite)

L'hypothèse (H4) retenue à la section 1.1.3 impose qu'une fissure se propageant à partir d'un point de la microstructure granulaire discrète ne peut rejoindre qu'un sous-ensemble des points de la discrétisation \mathcal{Y}_E situé dans le "champ de vision local" de la fissure. Ce sous-ensemble de points est appelé, dans la suite, les points candidats. Le champ de vision local de la fissure (Figure 2.2) est défini de la façon suivante :

Définition 2.1.1. Champ de vision local : soit E une microstructure et $x \in \mathcal{X}_E$ le point désignant la pointe de fissure. Si \vec{u}_x est la direction de propagation en x , le champ de vision local est la zone contenant l'ensemble des points $\{y_i^E\}_{i \in I} \subset \mathcal{Y}_E$ tel que :

$$\langle \vec{xy}_i^E, \vec{u}_x \rangle \geq 0 \quad (2.1)$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire euclidien dans \mathbb{R}^2 .

\vec{u}_x est la direction préférentielle locale de propagation au point x dans une microstructure E (Figure 2.2).

Selon le point initial x , le champ de vision local ne présente pas toujours la possibilité de longer le granulat, ce qui aura une influence sur la suite de la trajectoire et devra être pris en compte dans le modèle de prédiction.

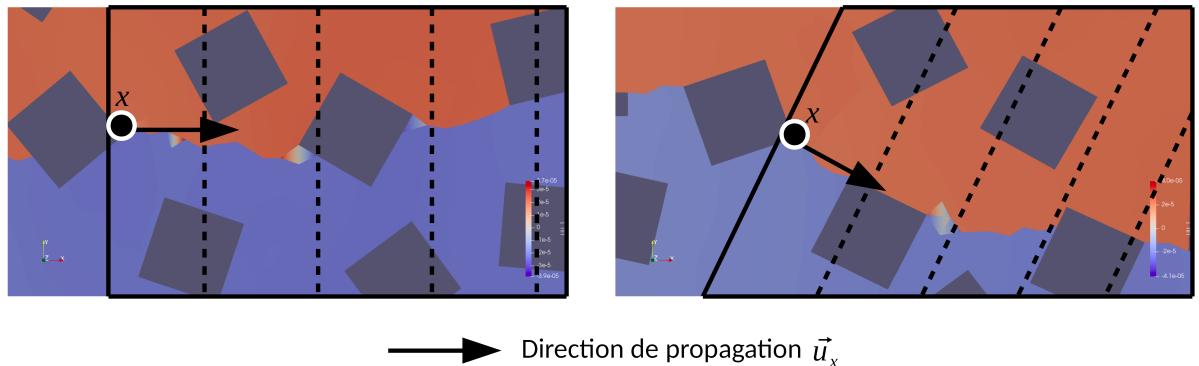


FIGURE 2.2 – Exemples de champs de vision locaux (zone hachurée) en un point de discréétisation x , en fonction de la direction de propagation de la fissure \vec{u}_x . Tous les granulats de la zone hachurée sont considérés

En effet, l’interface matrice-granulats et la matrice ont des caractéristiques mécaniques différentes (Hypothèses (H1) et (H3) de la section 1.1.3). Par conséquent le comportement de la fissure est impacté par la nature des points candidats qui se présentent dans son champ de vision. C’est pourquoi, deux types de configurations du champ de vision local sont distinguées selon qu’il existe ou pas un point parmi les points candidats appartenant au même granulat :

- **Configuration F1** : champ de vision local avec la possibilité de suivre le granulat ou de traverser la matrice (Figure 2.3)

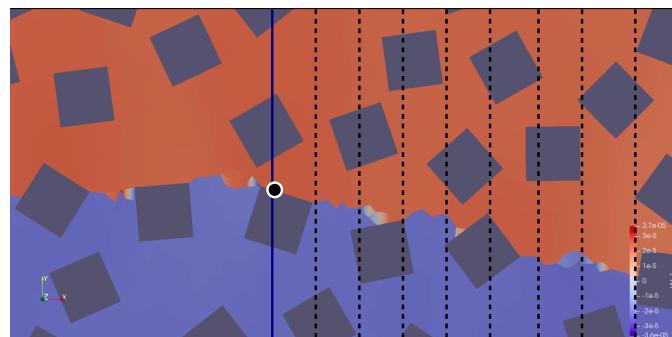


FIGURE 2.3 – Exemple de champ de vision local (zone hachurée) dans la configuration F1 (la pointe de fissure est signalée par un cercle blanc)

- **Configuration F2** : champ de vision local avec seulement des possibilités de traverser la matrice (Figure 2.4)

2.2 Indicateurs géométriques locaux pour la caractérisation de la fissuration

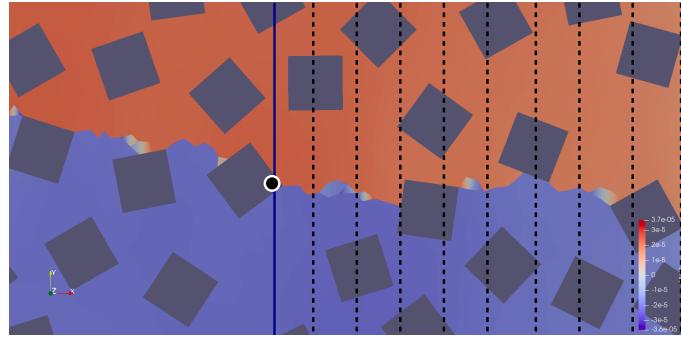


FIGURE 2.4 – Exemple de champ de vision local (zone hachurée) dans la configuration F2 (la pointe de fissure est signalée par un cercle blanc)

2.2.1 Définition des indicateurs

Nous nous intéressons dans cette section à la construction d'indicateurs permettant de capturer le comportement local d'une fissure. Deux indicateurs de nature géométrique sont proposés. Le premier s'appuie sur la notion d'angle et permet de prendre en compte l'effet de la direction préférentielle locale de propagation (Hypothèse (H4)). Le second indicateur est lié à la notion de distance entre les points de la discréétisation et permet de prendre en compte l'attractivité de l'interface matrice-grannulat associé au coût énergétique de la propagation (Hypothèse (H3)).

Définition 2.2.1. *Les deux indicateurs locaux*

Soit E une microstructure granulaire discrète, $x \in \mathcal{X}_E$ le point désignant la pointe de fissure et \vec{u}_x la direction de propagation en x . Si $\langle \cdot, \cdot \rangle$, resp. $\|\cdot\|$, est le produit scalaire euclidien, resp. la norme euclidienne, dans \mathbb{R}^2 , pour chaque point candidat y , les deux indicateurs locaux sont :

$$\begin{aligned} d_x(y) &= \|\vec{xy}\| \\ \theta_x(y) &= \frac{|\arccos(\langle \vec{xy}, \vec{u}_x \rangle)|}{\|\vec{xy}\| \|\vec{u}_x\|} \end{aligned}$$

Une version normalisée de ces indicateurs est également introduite et s'écrit :

$$\begin{aligned}\tilde{d}_x(y) &= \frac{d_x(y) - d_{x,min}}{d_{x,max} - d_{x,min}} \\ \tilde{\theta}_x(y) &= \frac{\theta_x(y) - \theta_{x,min}}{\theta_{x,max} - \theta_{x,min}}\end{aligned}$$

où $d_{x,max}, d_{x,min}$ et $\theta_{x,max}, \theta_{x,min}$ sont les valeurs maximales et minimales des indicateurs associés aux points candidats se situant dans le champ de vision de x .

Dans la configuration F1, on s'attend à ce que la fissure privilégie la frontière du granulat (zone faible). Par conséquent, les distances $\tilde{d}_x(y)$ petites seront préférentiellement choisies par la fissure car elles correspondent à un coût énergétique moindre. De plus, les angles $\tilde{\theta}_x(y)$ petits seront aussi préférentiellement choisis car ils correspondent à une propagation dans la direction locale $\overrightarrow{u_x}$ en mode I pour la fissure.

Dans la section 2.2.3, la pertinence de ces nouveaux indicateurs pour capturer le comportement local d'une fissure est étudiée à partir de l'analyse d'une base d'apprentissage issue des calculs XPER. Avant cela, nous nous focalisons dans la section suivante sur leur évaluation en pratique.

2.2.2 Calculs des indicateurs locaux

Pour chaque point x correspondant à la pointe de fissure, l'évaluation des indicateurs consiste à calculer la distance d_x et l'angle θ_x pour tous les points dans le champ de vision local susceptibles d'être atteints par la fissure.

Une première étape est donc de trier parmi tous les points appartenant au champ de vision local les points candidats. En effet selon l'hypothèse (H2), tous les points du champ de vision local ne peuvent être atteints par la fissure en raison de la présence des granulats et donc doivent être supprimés des points candidats. Pour un granulat donné dans le champ de vision, la procédure de suppression des points non accessibles est basée sur la détection d'une zone non-visible à partir de x due à la présence du granulat (Figure 2.6). Par analogie avec l'ombre générée par un obstacle devant une source de lumière, cette zone d'écrantage est appelée dans la suite une zone d'ombre.

La méthode pour identifier cette zone d'ombre et pour supprimer les points de discréétisation correspondants est donnée par la procédure 2.2.1. Pour éviter une dépendance à l'orientation et la position, elle repose sur des principes de géométrie algorithmique [69]. Ici et pour la suite une hypothèse forte est formulée : les granulats sont supposés convexes. Cette procédure est appliquée à chaque granulat dans le champ de vision et conduit à une forte réduction du nombre de points candidats à la propagation de fissure. Cette procédure est valable quelque soit la direction du champ de vision.

Procédure 2.2.1. *Suppression de points dans la zone d'ombre d'un granulat*

Soient E une microstructure granulaire discrète, $x \in \mathcal{X}_E$ une pointe de fissure et $\{y_j^E\}_{j=1,\dots,n_E}$ les n_E points discréétisant les côtés d'un granulat G se situant dans le champ de vision local. Pour tout $(i, k) \in \{1, \dots, n_E\}^2$, on désigne par $\langle xy_i^E xy_k^E \rangle$ la valeur absolue de la mesure dans $[0, \pi]$ de l'angle défini par les 2 vecteurs $\overrightarrow{xy_i^E}$ et $\overrightarrow{xy_k^E}$.

La suppression est basée sur l'identification des points se trouvant dans la zone d'ombre du granulat. On définit les deux points y_1^* et y_2^* tels que $\langle xy_1^* xy_2^* \rangle = \max_{(i,k) \in \{1, \dots, n_E\}^2} \langle y_i^E xy_k^E \rangle$. Cet angle définit un cône de recherche (Figure 2.5)

Le déterminant de deux vecteurs de \mathbb{R}^2 représentant la surface signée du parallélogramme défini par ces deux vecteurs, un point z dans le champ de vision fait partie du cône si :

$$\det(\overrightarrow{xy_2^*}, \overrightarrow{xz}) \det(\overrightarrow{xy_1^*}, \overrightarrow{xz}) < 0$$

Un point z dans le cône fait partie de la zone d'ombre et doit être supprimé si (Figure 2.6) :

$$\det(\overrightarrow{xy_1^*}, \overrightarrow{y_1^*z}) \det(\overrightarrow{y_1^*z}, \overrightarrow{y_1^*y_2^*}) < 0$$

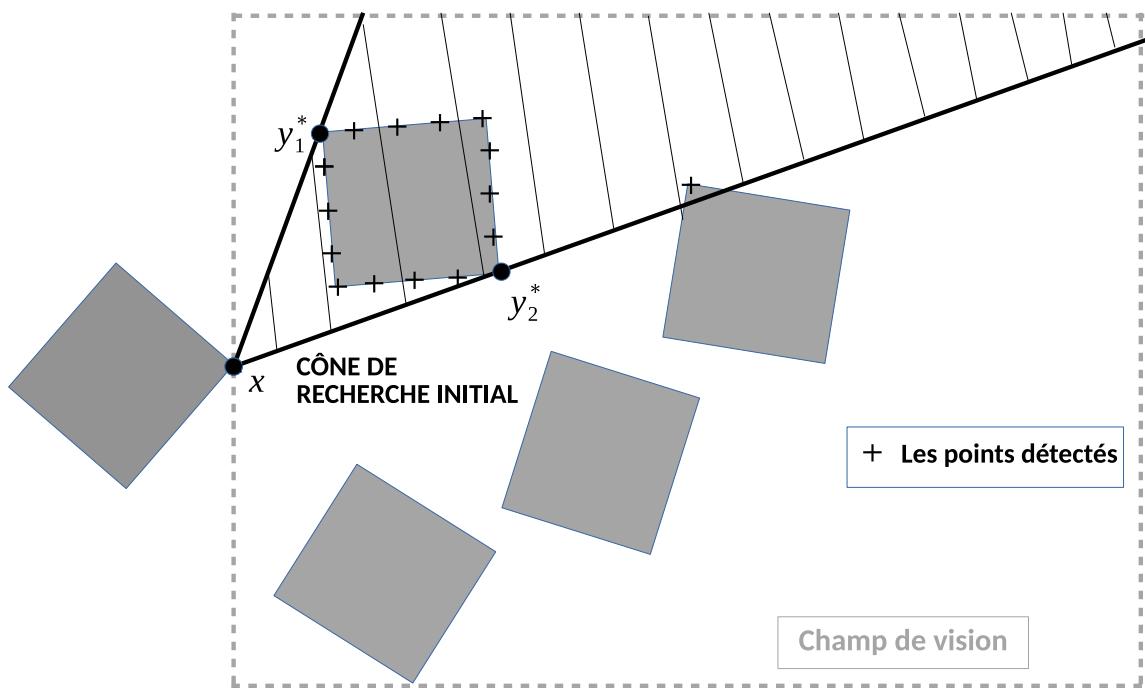


FIGURE 2.5 – Illustration de la procédure 2.2.1 : construction du cône de recherche (zone hachurée) afin de délimiter la zone d'ombre. La direction locale de propagation est supposée horizontale

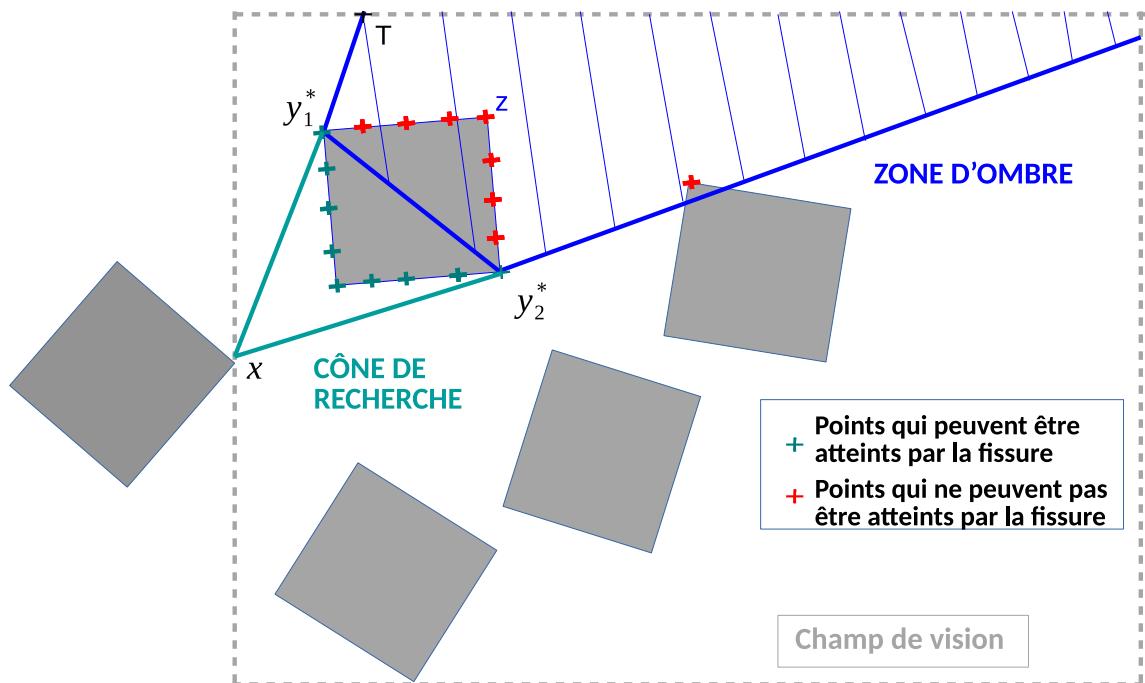


FIGURE 2.6 – Illustration de la procédure 2.2.1 : construction de la zone d'ombre (zone hachurée) et redéfinition du cone de recherche. La direction locale de propagation est supposée horizontale

2.2.3 Évaluation des indicateurs

Dans cette section, une évaluation de la pertinence des deux indicateurs géométriques à rendre compte des caractéristiques locales du comportement de la fissure est menée. Cette analyse sera également exploitée pour définir et justifier les termes intervenant dans l'expression du modèle de prédiction proposé dans la section 2.3.

Les indicateurs sont évalués en chaque pointe des fissures en utilisant la procédure 2.2.1 pour déterminer les points candidats et cela pour un ensemble de microstructures numériques dont la fissuration a été simulée par le code XPER dans les conditions de l'étude réalisée à la section 1.1.5. Dans ce cas, la direction locale orientant le champ de vision est toujours perpendiculaire à l'effort de traction (mode I). L'analyse est effectuée en considérant les deux configurations du champ de vision local (Figure 2.3, Figure 2.4). La Figure 2.7 et la Figure 2.9 présentent les résultats pour deux types de granulats : carrés et multiformes. Les mêmes tendances sont observées pour les deux types de granulats. Pour cette raison, dans la suite, nous limitons notre analyse aux granulats carrés. Dans la Figure 2.7 et la Figure 2.9, les points correspondent aux couples $(d_x(y), \theta_x(y))$ de tous les points candidats par lesquels est effectivement passée la fissure selon les deux configurations.

- Analyse de la configuration F1 (Figure 2.7)

La Figure 2.7 confirme que la fissure privilégie la frontière du granulat (zone la moins tenace). Cette situation correspond au grand nombre de points verts avec la distance la plus courte et une plage de variation entre 0° et 90° pour l'angle. L'indicateur de distance a donc très peu d'influence quand la fissure reste sur le même granulat.

Il est important de noter que l'attractivité du point sur le même granulat peut être moins forte dans certains cas. En effet, la fissure choisit parfois de traverser la matrice même si elle a la possibilité de suivre le granulat (points rouges sur la Figure 2.7), comme on peut le constater sur les exemples de la Figure 2.8.

Ce changement de comportement dans la propagation de la fissure advient lorsque rester sur le même granulat impose à la fissure de faire un grand angle alors qu'il existe un point candidat sur un granulat voisin proche et ne nécessitant pas de trop s'écartez du mode I.

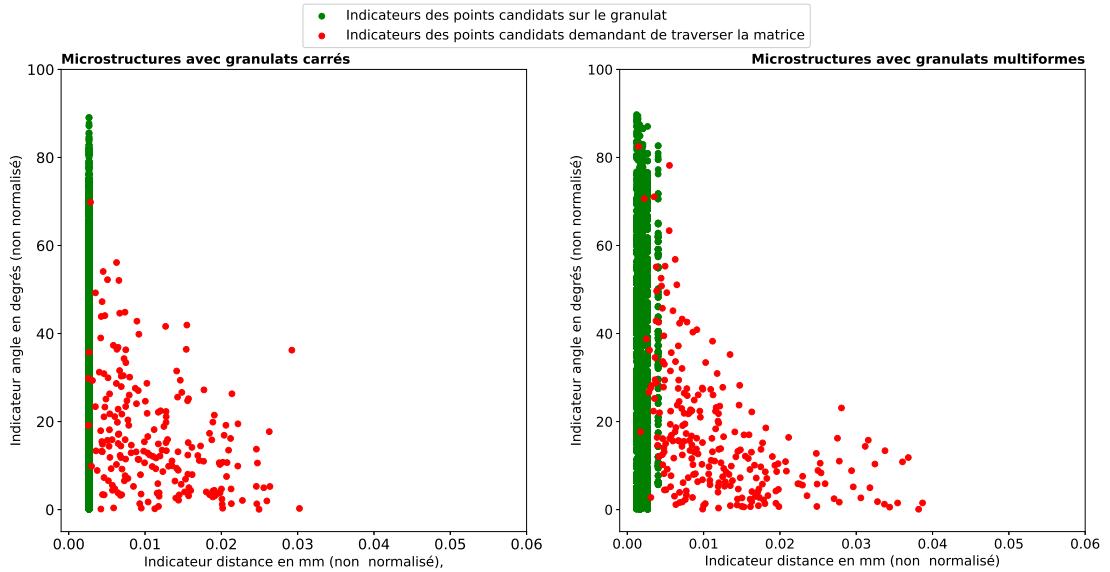


FIGURE 2.7 – Valeurs des indicateurs pour la configuration F1 associés aux points de la fissure pour des microstructures à granulats carrés (à gauche) et pour des microstructures à granulats multiformes (à droite) : évaluation de 4994 couples d’indicateurs (d, θ) choisis par les fissures issues de 35 microstructures à granulats carrés et 5343 couples d’indicateurs (d, θ) choisis par les fissures issues de 30 microstructures à granulats multiformes

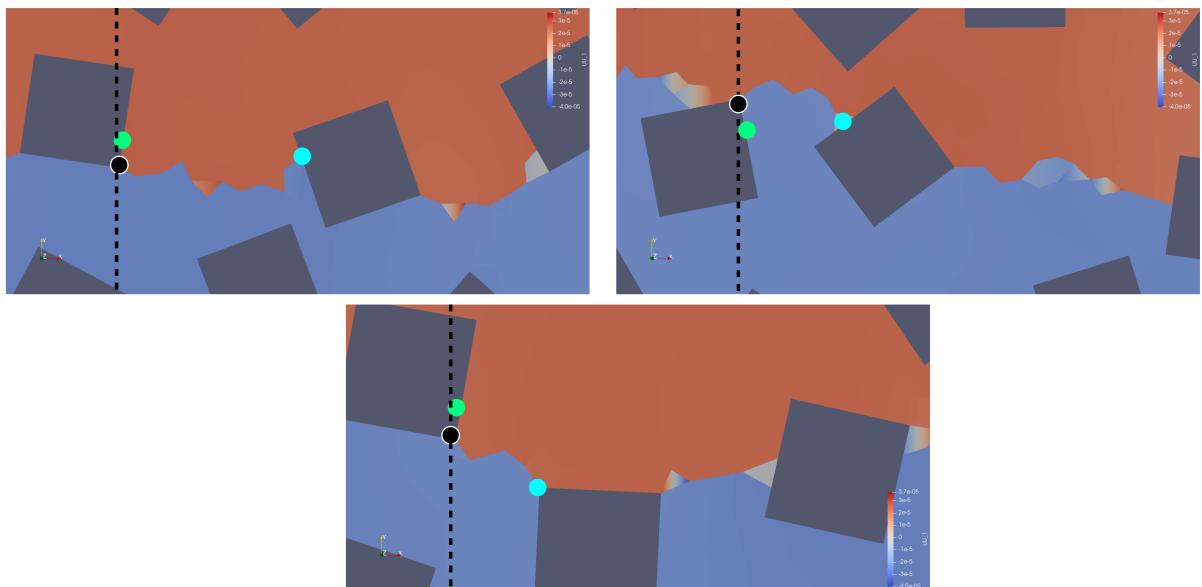


FIGURE 2.8 – Exemples de cas où la fissure traverse la matrice (point bleu) au lieu de suivre le granulat (point vert), le début du champ de vision est marqué par la ligne noire en pointillé

- Analyse de la configuration F2 (Figure 2.9)

Dans cette configuration, comme il n'y a pas de points candidats sur le même granulat, la fissure ne peut que se propager dans la matrice. Les valeurs des indicateurs des points candidats atteints par la fissure sont concentrées dans le coin inférieur gauche du graphique (petite distance et petit angle). Cela reflète le fait que la fissure est à la fois contrainte par le mode I et attirée par les zones les moins tenaces.

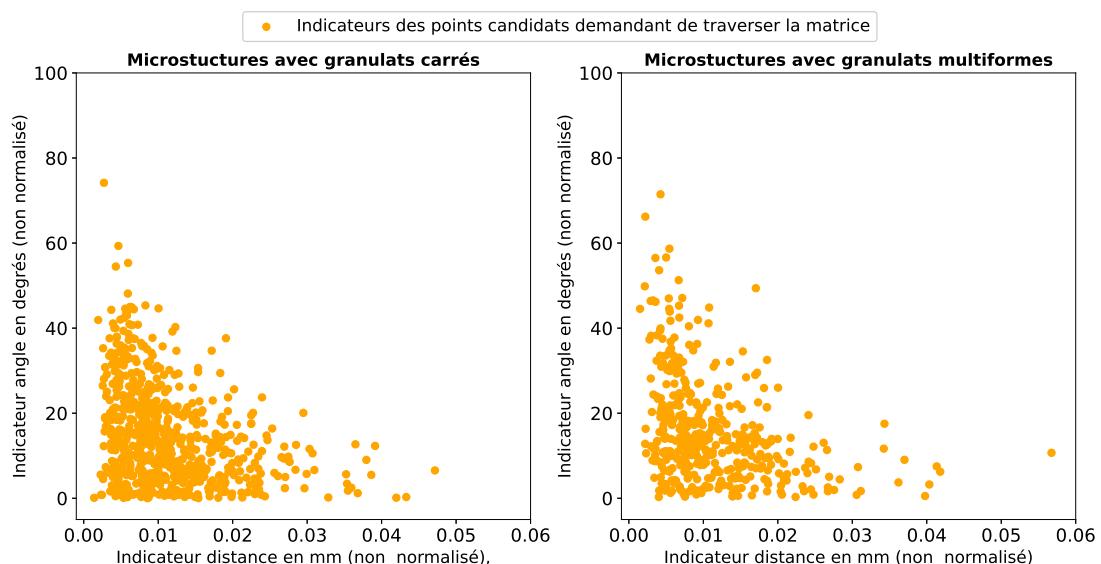


FIGURE 2.9 – Valeurs des indicateurs pour la configuration F2 associés aux points de la fissure pour des microstructures à granulats carrés (à gauche) et pour des microstructures à granulats multiformes (à droite) : évaluation de 680 couples d'indicateurs (d, θ) choisis par les fissures issues de 35 microstructures à granulats carrés et 415 couples d'indicateurs (d, θ) choisis par les fissures issues de 30 microstructures à granulats multiformes

Les deux indicateurs géométriques choisis, fournissent donc des informations permettant de caractériser et discriminer le comportement local de la fissure. Ils sont intégrés dans un modèle probabiliste de prédiction qui fait l'objet de la section suivante.

Remarque 2.2.1. *Dans cette étude, la direction locale de propagation est connue a priori et est perpendiculaire à l'effort de traction. Cette information est fournie au modèle de prédiction de chemin de fissuration construit dans ce chapitre. Toutefois, il est possible de prendre en compte une direction locale de propagation non constante et par conséquent d'orienter le champ de vision local. Un exemple d'application avec direction locale variable est détaillé au chapitre 4.*

2.3 Modèle probabiliste pour la prédition de la trajectoire d'une fissure

Le modèle de prédition est basé sur une modélisation à base de chaîne de Markov rappelée à la section 1.2.2 dont la loi de la transition dépend du couple d'indicateurs locaux précédemment introduits.

Loi de transition

Les points de discréétisation décrivant la trajectoire de la fissure, $\{x_i^E\}_{i=1,\dots,m_E}$, sont supposés être des réalisations d'une chaîne de Markov homogène (Définition 1.2.1). La définition suivante spécifie le type de loi de transition adoptée dans ce travail.

Définition 2.3.1. *Pour une microstructure granulaire discrète E , on suppose que $(X_i^E)_{i=1,\dots,m_E}$ est une suite de variables aléatoires qui constitue la chaîne de Markov homogène. $\{x_i^E\}_{i=1,\dots,m_E}$ définit un ensemble de réalisations de la chaîne de Markov et la loi de transition de la chaîne décrivant le choix local de la fissure de x à y est la suivante :*

$$P_E(X_{i+1}^E = y | X_i^E = x) = c_{x,\Lambda} f_\Lambda(\tilde{d}_x(y), \tilde{\theta}_x(y)) \quad (2.2)$$

où P_E indique la probabilité conditionnelle sachant la microstructure granulaire discrète E , $c_{x,\Lambda}$ est la constante de normalisation pour définir une probabilité et f_Λ est une fonction à choisir avec Λ un ensemble de paramètres à déterminer. On fixe la première réalisation $X_0^E = x_0^E$, le point de départ de la fissure qui est choisi sur la microstructure granulaire discrète. En particulier on a,

$$P_E(X_0^E = x_0^E, \dots, X_{m_E}^E = x_{m_E}^E) = \prod_{i=0}^{m_E-1} P_E(X_{i+1}^E = x_{i+1}^E | X_i^E = x_i^E) \quad (2.3)$$

Le but de ce modèle est de reproduire le comportement de la fissure en pondérant l'importance des indicateurs selon une configuration locale donnée dans la microstructure. La présence ou non de points candidats sur la frontière du même granulat influence la trajectoire de la fissure. Ceci a été pris en compte dans la section 2.1 par l'introduction de deux configurations (F1 et F2) du champ de vision local. L'expression de la fonction f_Λ (et de la loi de transition) doit donc dépendre aussi de la configuration.

Modélisation 2.3.1. *Soit x un point de discréétisation atteint par la fissure appartenant au granulat G . Si $\{y_k^E\}_{k=1,\dots,K_E}$ est l'ensemble des points*

candidats dans le champ de vision local de x , alors la loi de transition est donnée par :

Configuration F1 : soit $\Lambda_{F1} = (\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4, \mu_5, \mu_6)$ l'ensemble des paramètres associé à cette configuration. Si $\{y_k^E\}_{k=1, \dots, r_E}$ définit l'ensemble des points candidats sur G et $\{y_k^E\}_{k=r_E+1, \dots, K_E}$ les points candidats des autres granulats alors $c_{x,\Lambda} = c_{x,\Lambda_{F1}}$ et $f_\Lambda = f_{\Lambda_{F1}}$ avec :

$$c_{x,\Lambda_{F1}} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{r_E} e^{-\mu_1(\tilde{\theta}_x(y_k^E))^{\mu_2}} + \sum_{p=r_E+1}^{K_E} e^{-\mu_3(\tilde{d}_x(y_k^E)\tilde{\theta}_x(y_k^E))^{\mu_6} - \mu_4(\tilde{d}_x(y_k^E))^{\mu_5}}}$$

et

$$f_{\Lambda_{F1}} = e^{-\mu_1(\tilde{\theta}_x(y))^{\mu_2}} \mathbb{1}_{y \in G} + e^{-\mu_3(\tilde{d}_x(y)\tilde{\theta}_x(y))^{\mu_6} - \mu_4(\tilde{d}_x(y))^{\mu_5}} \mathbb{1}_{y \notin G}$$

Configuration F2 : soit $\Lambda_{F2} = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5, \lambda_6)$ l'ensemble des paramètres associé à cette configuration alors $c_{x,\Lambda} = c_{x,\Lambda_{F2}}$ et $f_\Lambda = f_{\Lambda_{F2}}$ avec :

$$c_{x,\Lambda_{F2}} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{K_E} e^{-\lambda_1(\tilde{d}_x(y_k^E)\tilde{\theta}_x(y_k^E))^{\lambda_5} - \lambda_2(\tilde{d}_x(y_k^E))^{\lambda_6} - \lambda_3(\tilde{\theta}_x(y_k^E))^{\lambda_4}}}$$

et

$$f_{\Lambda_{F2}} = e^{-\lambda_1(\tilde{d}_x(y)\tilde{\theta}_x(y))^{\lambda_5} - \lambda_2(\tilde{d}_x(y))^{\lambda_6} - \lambda_3(\tilde{\theta}_x(y))^{\lambda_4}}$$

Remarque 2.3.1. Le terme multipliant les deux indicateurs $\tilde{d}_x(y)\tilde{\theta}_x(y)$ est appelé terme d'interaction par la suite.

Il est important de noter que dans la configuration F1, la distinction entre la possibilité de suivre le granulat et la possibilité de traverser la matrice est prise en compte par la fonction caractéristique du granulat. Le choix des indicateurs utilisés dans la configuration F1 est expliqué par la nature des points étudiés :

- pour les points candidats sur le même granulat, comme on l'a observé dans la section 2.2.3, la distance a très peu d'influence, par conséquent seul l'indicateur de l'angle est intégré dans cette partie du modèle associé au couple de paramètres (μ_1, μ_2) .
- pour les points candidats qui nécessitent de traverser la matrice, expérimentalement, c'est la proximité d'un granulat voisin qui joue un

rôle prépondérant dans le changement de comportement de la fissure (Figure 2.8). C'est pourquoi le terme d'angle est uniquement pris en compte dans le terme d'interaction contrairement au modèle pour la configuration F2. Cette partie du modèle comprend donc le terme d'interaction associé à (μ_3, μ_6) et l'indicateur de distance associé à (μ_4, μ_5) . Cela permet notamment de réduire le nombre de paramètres dans le modèle et la variabilité de leur estimation.

Plus généralement, le terme d'interaction permet d'intégrer dans les deux configurations F1 et F2 l'effet de la combinaison des faibles valeurs de ces deux indicateurs qui a été identifié à la section 2.2.3. Il contraint la fissure à suivre une direction de propagation locale tout en conservant l'attractivité des granulats voisins.

Estimation des paramètres de la loi de transition

Les deux ensembles de paramètres du modèle sont estimés à partir d'un ensemble de microstructures d'apprentissage dont la fissuration a été simulée avec XPER. Comme rappelée dans la section 1.2.2, l'estimation est effectuée par maximisation de la vraisemblance. Plus précisément, si $\{E_i\}_{i=1,\dots,Q}$ est l'ensemble d'apprentissage des microstructures granulaires discrètes et $\{x_j^{E_i}\}_{j \in I_{E_i}^{F1}}$ et $\{x_j^{E_i}\}_{j \in I_{E_i}^{F2}}$ sont les ensembles des points sélectionnés par la fissure sur la microstructure E_i selon les deux configurations, les deux ensembles de paramètres estimés notés Λ_{F1}^* et Λ_{F2}^* sont solutions de :

- Configuration F1 :

$$\Lambda_{F1}^* = \arg \max_{(\mu_1, \dots, \mu_6)} \left\{ \prod_{i=1}^Q \prod_{j \in I_{E_i}^{F1}} P_{E_i} \left(X_{j+1}^{E_i} = x_{j+1}^{E_i} \mid X_j^{E_i} = x_j^{E_i} \right) \right\} \quad (2.4)$$

- Configuration F2 :

$$\Lambda_{F2}^* = \arg \max_{(\mu_1, \dots, \mu_6)} \left\{ \prod_{i=1}^Q \prod_{j \in I_{E_i}^{F2}} P_{E_i} \left(X_{j+1}^{E_i} = x_{j+1}^{E_i} \mid X_j^{E_i} = x_j^{E_i} \right) \right\} \quad (2.5)$$

où P_{E_i} est donné par la modélisation 2.3.1.

2.4 Prédiction de la trajectoire d'une fissure avec le modèle probabiliste

Cette section décrit la prédiction de la trajectoire d'une fissure pour une microstructure granulaire discrète donnée en utilisant la modélisation 2.3.1 dont les paramètres de la loi de transition ont déjà été estimés (leur estimation sera détaillée au chapitre suivant). Cette prédiction s'appuie sur une procédure qui à partir d'une pointe de fissure fournit le prochain point atteint dans le champ de vision local.

Plus précisément, les indicateurs géométriques introduits dans la définition 2.2.1 sont d'abord évalués en intégrant la procédure 2.2.1 pour déterminer l'ensemble des points candidats (respectant les hypothèses de la section 1.1.3) dans le champ de vision local de la pointe de fissure. Ensuite, le modèle de chaîne de Markov fournit la probabilité pour chaque point candidat d'être le prochain point sélectionné par la fissure. Enfin, un tirage aléatoire est réalisé à partir des probabilités évaluées pour sélectionner le prochain point atteint par la fissure. Cette procédure est formalisée dans la suite.

Procédure 2.4.1. *Étant donné x_i^E la pointe de fissure dans une microstructure granulaire discrète E et $\vec{u}_{x_i^E}$ la direction locale de propagation associée, la prédiction comprend trois étapes :*

- *Etape 1 : identifier le champ de vision local de x_i^E et déterminer les points candidats dans ce champ en utilisant la procédure 2.2.1 ($\{y_k^E\}_{k=1,\dots,K_E}$ est l'ensemble des points restants) et évaluer les indicateurs normalisés $\tilde{d}_{x_i^E}(y_k^E)$ et $\tilde{\theta}_{x_i^E}(y_k^E) \forall k$.*
- *Etape 2 : selon la configuration, calculer $\{P_E(X_{i+1}^E = y_k^E | X_i^E = x_i^E)\}_{k=1,\dots,K_E}$ ($m \in \{1, 2\}$) en utilisant la modélisation 2.3.1.*
- *Etape 3 : Tirer une réalisation à partir de la loi discrète $\sum_{k=1}^{K_E} P_E(X_{i+1}^E = y_k^E | X_i^E = x_i^E) \delta_{y_k^E}$.*

A partir de la position initiale de la fissure, cette procédure est itérée pour construire la fissure point par point jusqu'à ce que la limite de la microstructure soit atteinte.

La Figure 2.10 illustre cette procédure dans la configuration F2. De plus, l'algorithme 1 présente sous la forme d'un pseudo-code la fonction permettant d'effectuer les trois étapes précédentes de la prédiction.

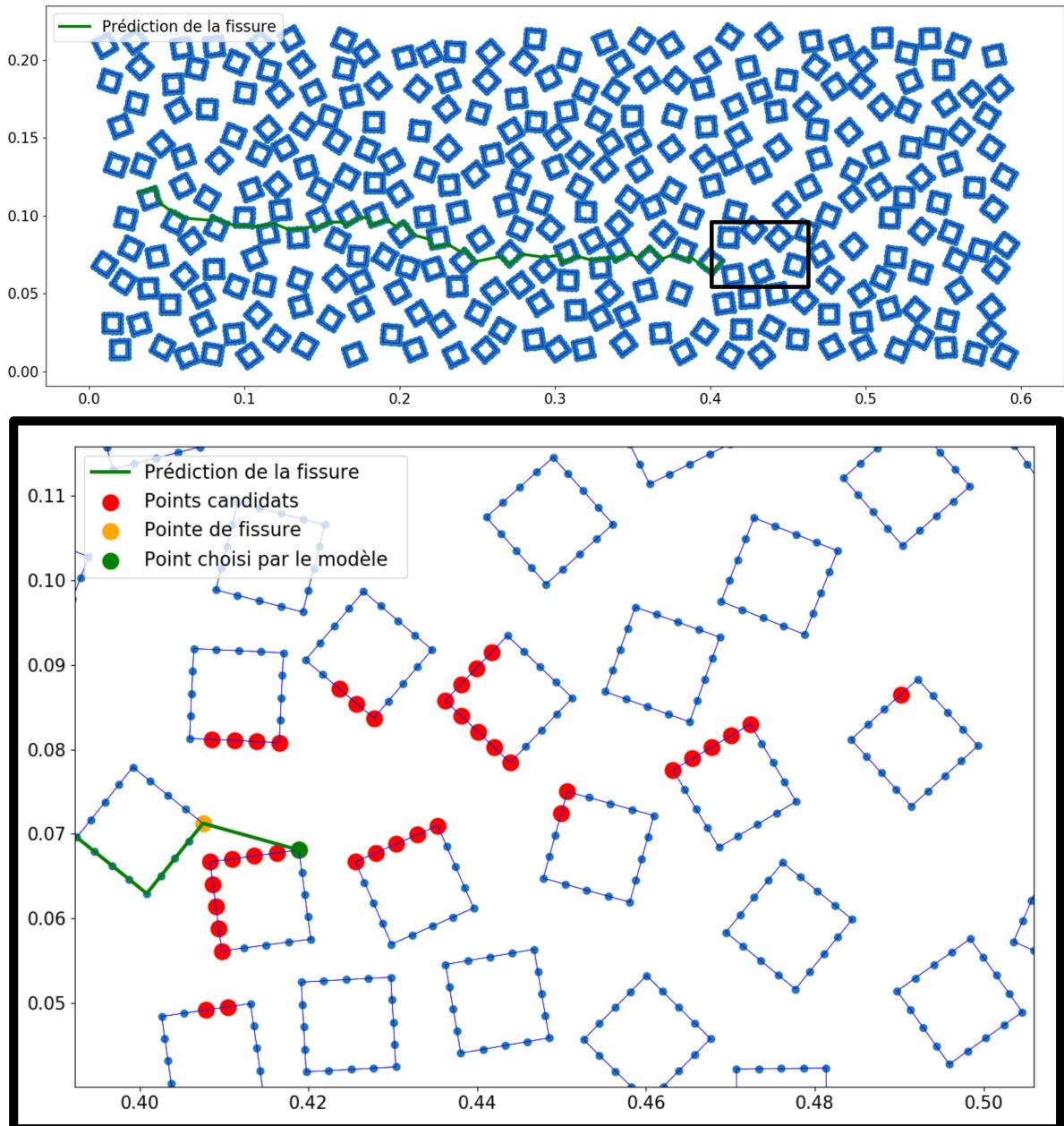


FIGURE 2.10 – Illustration de la procédure 2.4.1 dans la configuration F2 avec un agrandissement dans la zone d’intérêt. Le champ de vision local est orienté selon la direction de propagation perpendiculaire à l’effort de traction. Le point orange est la pointe de fissure, les points rouges sont les points candidats du champ de vision local où la probabilité d’être atteint est évaluée par le modèle, le point vert est le point sélectionné après tirage aléatoire pondéré

Algorithm 1 Prédiction locale

```
1:  $E$  est une microstructure granulaire discrète
2:  $x^E$  est la pointe de fissure
3:  $DirectionProp$  est la direction en mode I
4:  $ParamModel$  sont les paramètres estimés du modèle de prédiction
5: function FISSURE( $E, x^E, ParamModel, DirectionProp$ )
6:     ChampVisionGran = ensemble des granulats du champ de vision du
       point  $x^E$  associé à  $DirectionProp$ 
7:     ChampVisionPoint=ensemble des points situés sur les granulats de
       ChampVisionGran
8:     for G dans ChampVisionGran do
9:         OmbreG= Zone d'ombre du granulat G
10:        for point dans ChampVisionPoint do
11:            if point dans OmbreG then
12:                Supression des points dans ChampVisionPoint
13:            end if
14:        end for
15:    end for
16:    ProbaPoint=MarkovChainModel(ChampVisionPoint,  $ParamModel$ )
17:    PositionPointChoisi=TiragePonderé(ProbaPoint)
18: return PositionPointChoisi
19: end function
```

Le modèle de prédiction est stochastique. Partant de la même position initiale de la fissure, il peut être appliqué pour obtenir plusieurs réalisations de la trajectoire de la fissure. Il permet donc de quantifier l'incertitude associée à la prédiction.

Conclusion

Un modèle probabiliste de prédiction de la trajectoire d'une fissure a été proposé. À partir d'une pointe de fissure, il a pour objectif de fournir une estimation rapide de la probabilité qu'un point donné de la microstructure granulaire discrète soit le prochain point atteint par la fissure.

Pour cela, sa construction s'appuie d'abord sur l'évaluation de deux indicateurs géométriques d'angle et de distance associés à chaque point candidat. Ces indicateurs ont été définis formellement et une procédure efficace à base de cone d'écrantage pour les évaluer a été développée. Les résultats issus de leur évaluation ont montré qu'ils permettent de capturer des informations cohérentes avec l'analyse mécanique du comportement d'une fissure. Ces indicateurs ont ensuite servi de base au développement d'une loi de trans-

sition d'un modèle de chaîne de Markov homogène qui constitue le modèle de prédiction. Cette loi de transition est suffisamment flexible pour prendre en compte l'attractivité du granulat mais également le respect d'une direction privilégiée de propagation de la fissure. Ses paramètres sont estimés à partir d'un ensemble d'apprentissage de microstructures déjà fissurées. Les différentes étapes pour effectuer une prédiction avec le nouveau modèle ont enfin été décrites. Elles combinent évaluation des indicateurs et tirage aléatoire à partir d'une loi de probabilité discrète pondérée. À l'issue de la prédiction, le modèle fournit plusieurs réalisations de la trajectoire de la fissure qui peuvent être exploitées pour quantifier l'incertitude de prédiction.

Chapitre 3

Apprentissage et validation du modèle de prédiction

Introduction

Ce chapitre est dédié à l'évaluation numérique des performances du modèle de prédiction de fissure développé au chapitre précédent. Dans un premier temps, l'apprentissage du modèle est réalisé par l'algorithme d'optimisation BFGS sur une base de données issues de 35 microstructures fissurées par XPER, permettant ainsi de déterminer les valeurs des paramètres du modèle. Par la suite, l'évaluation des performances du modèle se fait d'abord sur l'ensemble d'apprentissage qui a servi à l'estimation des paramètres du modèle (étape de vérification). Cet ensemble est constitué de 35 microstructures (soit une base de 180593 couples d'indicateurs $(\tilde{d}_x(y), \tilde{\theta}_x(y))$) avec granulats carrés numériquement fissurées par le code XPER. Une étape de validation est également réalisée sur un ensemble test (i.e. n'ayant pas été utilisé dans la phase d'apprentissage) comprenant 30 microstructures avec granulats multiformes représentés par divers polygones réguliers avec un nombre de côtés variant de 3 à 8. Les deux ensembles sont issus des résultats de simulations obtenus dans les conditions similaires à l'étude de la section 1.1.5. Nous rappelons que dans ce cas la direction locale de propagation est toujours supposée perpendiculaire à l'effort de traction. Une application du modèle avec des directions locales de propagation variables estimées par un code Éléments Finis peu coûteux est fournie au chapitre 4. Il est important de garder à l'esprit que le changement de forme des granulats des microstructures de l'ensemble

d'apprentissage et de l'ensemble test ne nécessite pas de nouvelles simulations XPER. En effet, la base d'apprentissage ne change pas en fonction du type de granulat de la microstructure étudiée, de même pour la structure du modèle. L'idée est donc de confronter le modèle à des situations nouvelles afin de valider ses performances au delà de sa base d'apprentissage.

La section 3.1 porte sur l'estimation des paramètres du modèle avec une attention particulière à l'influence du nombre de microstructures dans l'ensemble d'apprentissage. Les sections 3.2 et 3.3 concernent ensuite la vérification et la validation du modèle en terme de prédiction du trajet de fissure et d'une grandeur mécanique d'intérêt pour les taux de fuite des bétons qui est la tortuosité. Enfin, dans la section 3.4, nous nous intéressons à l'influence de la forme des granulats de l'ensemble d'apprentissage sur les performances de la prédiction.

3.1 Estimation des paramètres du modèle : étape d'apprentissage

L'estimation des paramètres exploite un ensemble d'apprentissage de 35 microstructures à granulats carrés numériquement fissurées par le code XPER. Les maximisations de la vraisemblance (Equations 2.4 et 2.5) sont réalisées à l'aide de la version optimisée de l'algorithme BFGS présentée au chapitre 1. Cette optimisation est réalisée sur les indicateurs normalisés donc $\tilde{\theta}_x$ et \tilde{d}_x sont compris entre 0 et 1.

La Table 3.1 fournit les vecteurs de paramètre estimés. On rappelle que dans la modélisation 2.3.1, les paramètres μ_1 , μ_3 , μ_4 , λ_1 , λ_2 , λ_3 correspondent à des facteurs multiplicatifs, les autres sont des exposants.

Dans la configuration F1, les deux plus grandes valeurs des facteurs multiplicatifs (μ_3 et μ_4) et les deux plus faibles valeurs des exposants (μ_6 et μ_5) correspondent aux paramètres liés à la distance et au terme d'interaction. Ces derniers sont associés à la situation où le point candidat se situe sur un autre granulat. Il en résulte que la fissure aura tendance à privilégier un trajet sur le même granulat sauf si l'angle pour rester sur le granulat est élevé et que la traversée de la matrice est associée à des distances et angles faibles. Ceci est en accord avec l'analyse effectuée à la section 2.2.3.

Dans le cas de la configuration F2, on retrouve le même ordre de grandeur que dans la configuration F1 pour les valeurs des paramètres associés à la distance et au terme d’interaction.

μ_1	7.06	λ_1	34.2
μ_2	4.1	λ_2	9.2
μ_3	30.2	λ_3	13.16
μ_4	8.9	λ_4	1.79
μ_5	0.2	λ_5	1.08
μ_6	0.85	λ_6	0.42

TABLE 3.1 – Vecteurs de paramètres estimés, $\Lambda_{F1} = (\mu_1, \dots, \mu_6)$ et $\Lambda_{F2} = (\lambda_1, \dots, \lambda_6)$

Il est également intéressant d’étudier la variabilité de l’estimation des paramètres en fonction de la taille de l’ensemble d’apprentissage. Pour cela, 100 ensembles d’apprentissage sont générés avec des tailles allant de 2 à 33 microstructures.

La Figure 3.1 et la Figure 3.2 montrent l’estimation de la moyenne et de l’écart-type de chaque paramètre. Une stabilisation très rapide de l’estimation de la moyenne et de l’écart-type est observée pour la majorité des paramètres à partir d’une dizaine de microstructures. Dans tous les cas, au delà de 25 microstructures (environ 127215 couples d’indicateurs $(\tilde{d}_x(y), \tilde{\theta}_x(y))$), la stabilisation est atteinte pour tous les paramètres.

Le coefficient de variation est le rapport de l’écart-type sur la moyenne, il mesure la dispersion relative, plus sa valeur est faible, plus l’estimation est précise. Ici il est calculé pour une taille de l’ensemble d’apprentissage de 33 microstructures (Figure 3.3). Il est compris entre 0.2 et 2% pour l’ensemble des paramètres sauf pour le paramètre associé au terme d’interaction λ_1 dans la configuration F2, sa valeur est de 3.8%. Cette étude valide le nombre de microstructures (35) utilisées pour constituer l’ensemble d’apprentissage.

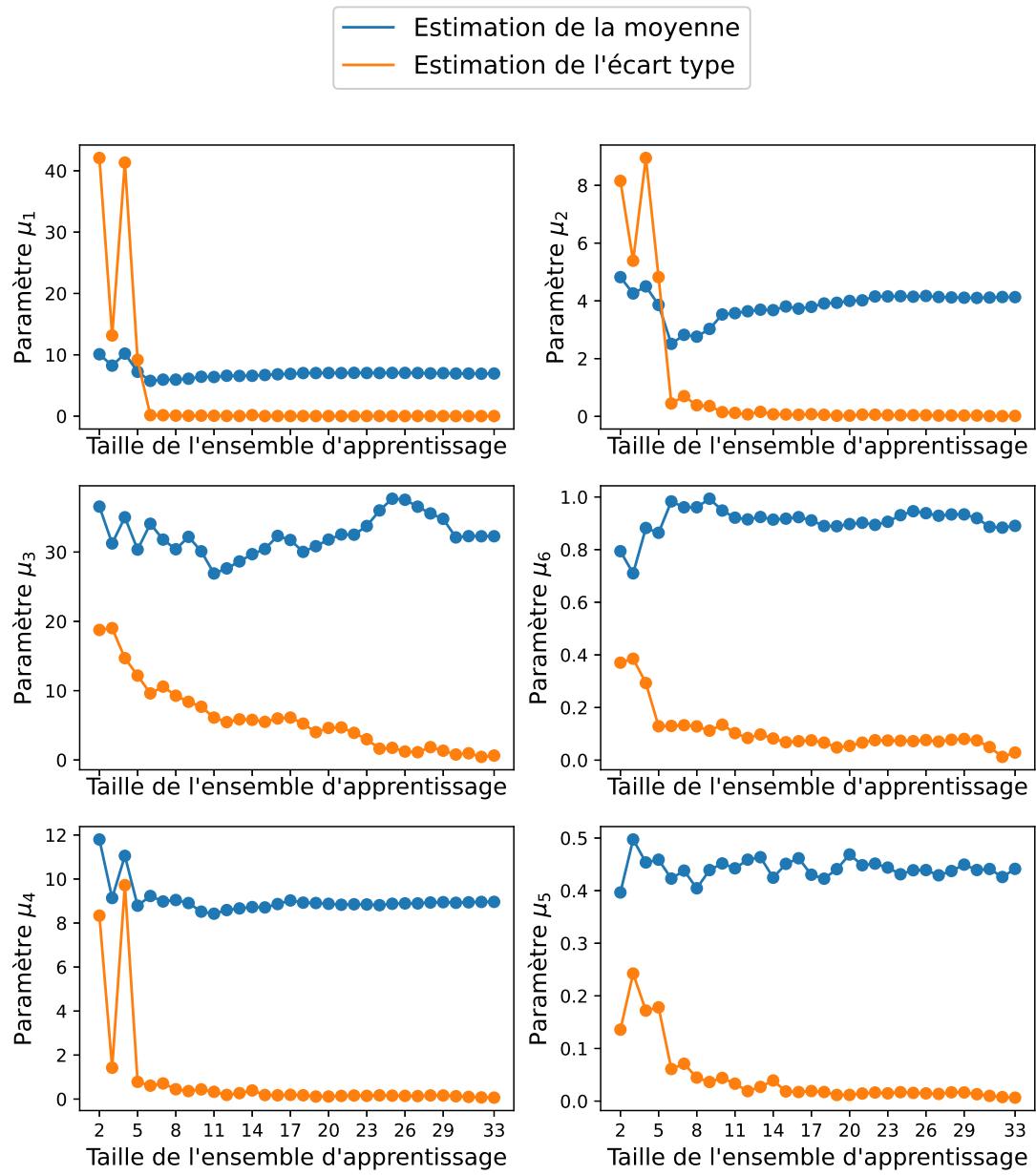


FIGURE 3.1 – Estimation des paramètres (moyenne et écart-type) en fonction de la taille de l'ensemble d'apprentissage dans la configuration F1. De haut en bas, paramètres associés à $\tilde{\theta}_x$, au terme d'interaction $\tilde{\theta}_x \times \tilde{d}_x$ et à \tilde{d}_x

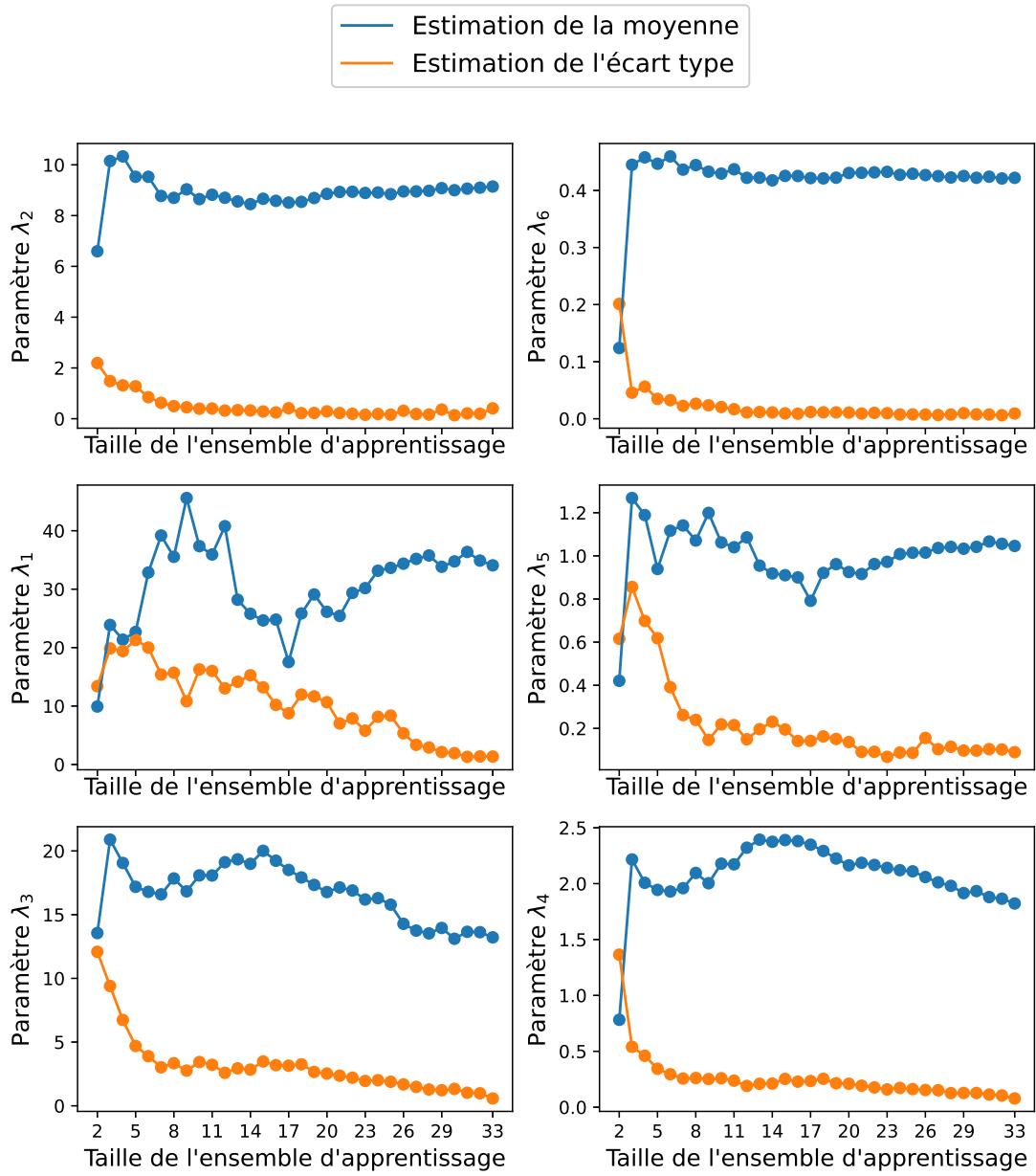


FIGURE 3.2 – Estimation des paramètres (moyenne et écart-type) en fonction de la taille de l'ensemble d'apprentissage dans la configuration F2. De haut en bas, paramètres associés à \tilde{d}_x , au terme d'interaction $\tilde{\theta}_x \times \tilde{d}_x$ et à $\tilde{\theta}_x$

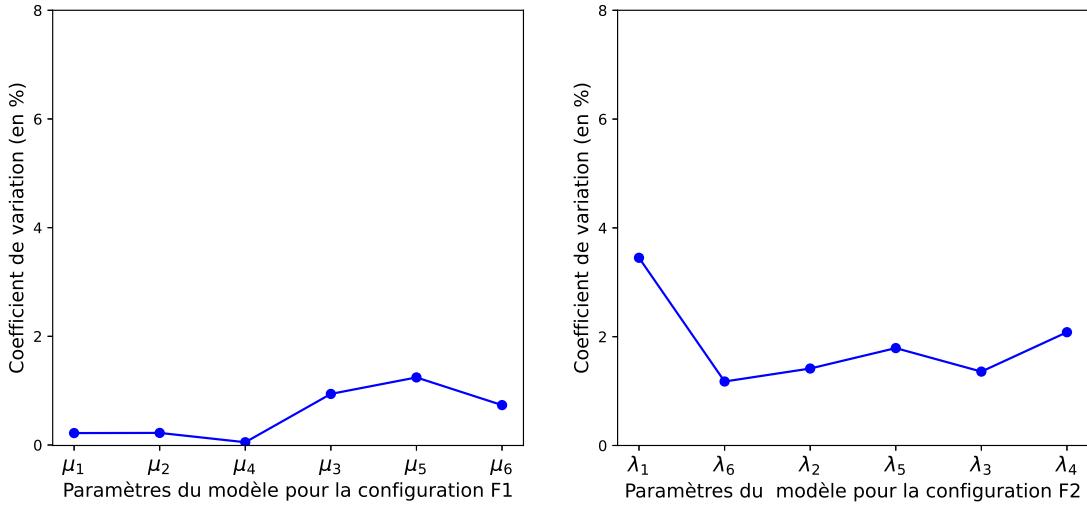


FIGURE 3.3 – Coefficient de variation (en pourcentage) calculé à partir de l'écart-type et de la moyenne des estimations des paramètres pour 100 ensembles d'apprentissage de 33 microstructures. Le graphique de gauche correspond à la configuration F1, le graphique de droite à la configuration F2

3.2 Prédiction de la fissure

Nous évaluons ici les performances du modèle avec les paramètres de la Table 3.1 pour la prédiction de la trajectoire de fissure.

Puisque le modèle est stochastique, il fournit M réalisations de trajectoires, chacune étant décrite par un ensemble de points de discréétisation de la microstructure granulaire discrète associée. Pour une microstructure E , nous désignons par $\mathcal{X}_E^k = \{x_{i,k}^E\}_{i=1,\dots,m_E^k}$ l'ensemble des points de la $k^{\text{ième}}$ réalisation ($k = 1, \dots, M$).

Si l'objectif est de prédire une trajectoire de fissure unique pour approcher la simulation déterministe du code XPER mais pour un faible coût, une réalisation médiane peut être construite à partir de l'ensemble des points \mathcal{X}_E^* satisfaisant :

$$\mathcal{X}_E^* = \arg \min_{\{\mathcal{X}_E^k\}_{k=1,\dots,M}} \left(\sum_{j=1, j \neq k}^M D(\mathcal{X}_E^k, \mathcal{X}_E^j) \right),$$

où D est ici la distance de Fréchet entre deux ensembles de points ([70], [71]).

Temps de calcul

La Table 3.2 fournit les temps de calcul moyens de construction d'une réalisation et de la réalisation médiane pour les ensembles d'apprentissage et de test.

Une itération de l'algorithme (voir algorithme 1)	0.0024
Une réalisation de fissure ($M = 1$)	0.24
Une réalisation médiane ($M = 100$)	25

TABLE 3.2 – Temps de calcul en minutes associé à la prédiction à l'aide du modèle probabiliste dans le cas d'un seul processeur (équivalent au temps CPU total puisqu'il n'y a qu'un seul processeur)

En comparant avec la Table 1.3, notre modèle permet donc un gain de temps de calcul conséquent par rapport au calcul XPER pour le calcul de la réalisation médiane (réduction du temps de calcul d'un facteur 2575 en comparant sur le même nombre de processeurs).

En exploitant la réalisation médiane obtenue à partir de $M = 100$ réalisations, nous présentons dans la suite une série de comparaisons entre la prédiction et la simulation XPER afin de vérifier sur l'ensemble d'apprentissage et valider notre modèle sur l'ensemble test.

Cohérence du comportement local de la réalisation médiane

Nous nous focalisons ici sur les valeurs prises par les indicateurs locaux associés aux points des réalisations médianes. Comme dans la section 2.2.3, la Figure 3.4 et la Figure 3.5 représentent les valeurs des indicateurs non normalisées mais dans ce cas pour les réalisations médianes. En comparant avec la Figure 2.7 et 2.9, on observe des comportements très similaires. En effet, dans la configuration F1, on observe une concentration de points pour de très faibles distances associées au suivi du même granulat (points verts). On constate également la combinaison de faibles valeurs de distance (proximité d'un granulat voisin) et d'angle (respect d'une direction en mode I) quand la fissure traverse la matrice dans les configurations F1 et F2 (points rouges).

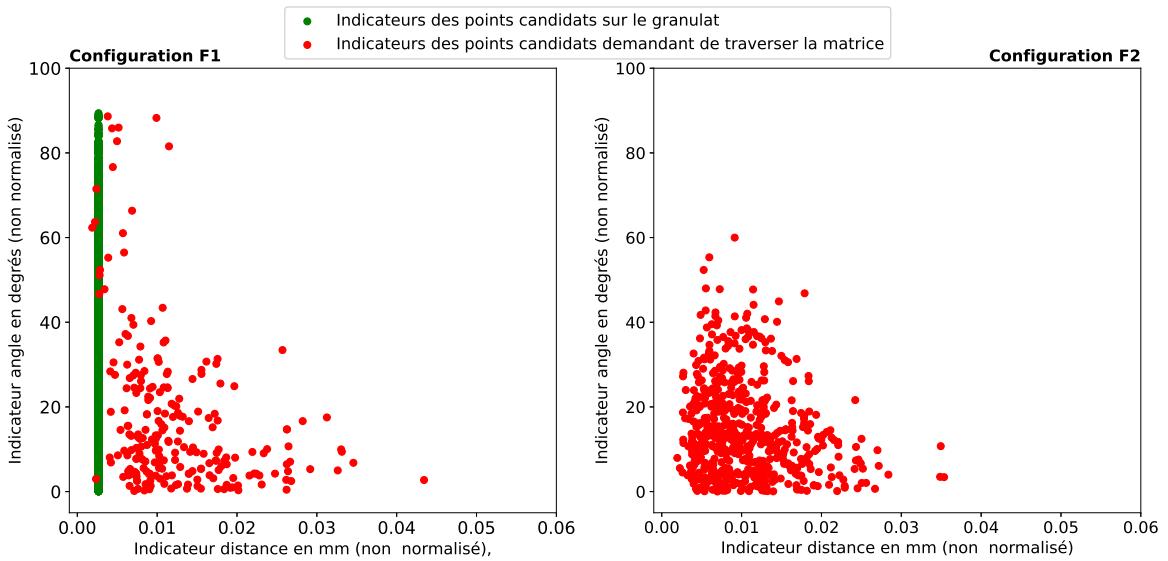


FIGURE 3.4 – Valeurs des indicateurs dans les configurations F1 (à gauche) et F2 (à droite) associées aux points sur les réalisations médianes pour les microstructures de l'ensemble d'apprentissage à granulats carrés

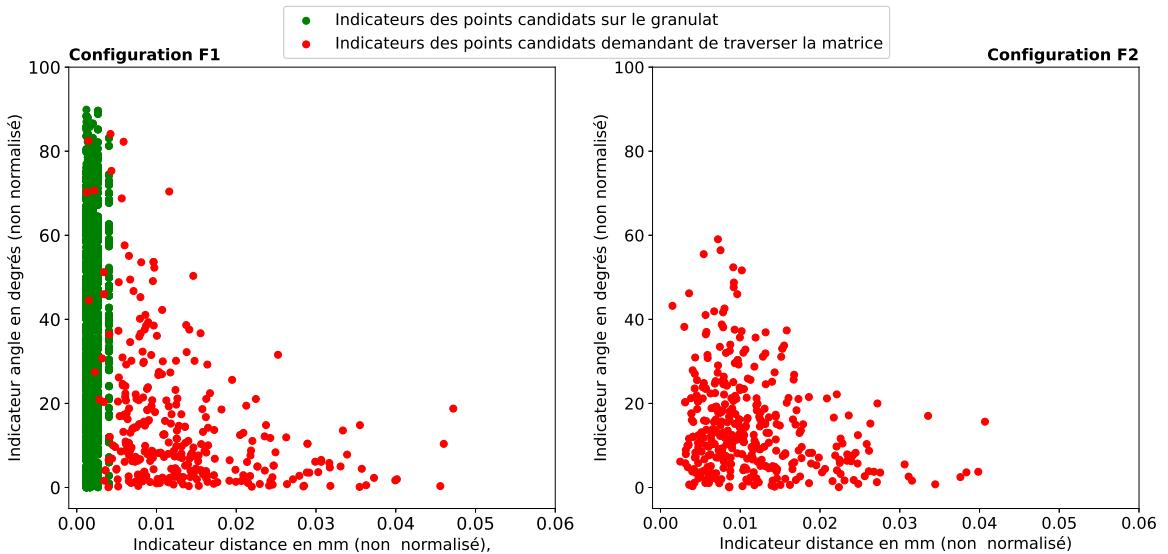


FIGURE 3.5 – Valeurs des indicateurs dans les configurations F1 (à gauche) et F2 (à droite) associées aux points sur les réalisations médianes pour les microstructures de l'ensemble test à granulats multiformes

De plus, dans la configuration F1, pour consolider la comparaison, la Table 3.3 fournit la proportion de choix locaux de suivre le même granulat ou de traverser la matrice. La réalisation médiane privilégie la frontière du même granulat dans les mêmes proportions que la fissure XPER.

Le terme d'interaction entre les deux indicateurs géométriques a une importance particulière pour reproduire avec fidélité le comportement de la

Ensemble d'apprentissage	Réalisation médiane	Fissure XPER
Choix de longer le granulat	95.1%	95.7%
Choix de traverser la matrice	4.8%	4.2%
Ensemble test		
Choix de longer le granulat	94.5%	95.3%
Choix de traverser la matrice	5.4%	4.7%

TABLE 3.3 – Proportion des choix associés à la réalisation médiane et à la simulation XPER pour les ensembles d'apprentissage et de test (configuration F1)

fissure dans les deux configurations. Pour illustrer son apport, la modélisation 2.3.1 est comparée à la même modélisation sans le terme d'interaction. L'estimation des paramètres du modèle sans interaction exploite également la base d'apprentissage de 35 microstructures utilisée dans la section 2.2.3 et est aussi optimisé par l'algorithme BFGS. Partant d'une pointe de fissure, la Figure 3.6 et la Figure 3.7 fournissent deux exemples caractéristiques de l'influence du terme d'interaction sur la probabilité des points du voisinage à être le prochain point rejoint par la fissure. Sur ces figures, le point orange est la pointe de fissure, les points rouges sont les points pour lesquels le modèle (avec ou sans interaction) estime une probabilité supérieure à 10%. La ligne brisée en violet représente la fissure XPER

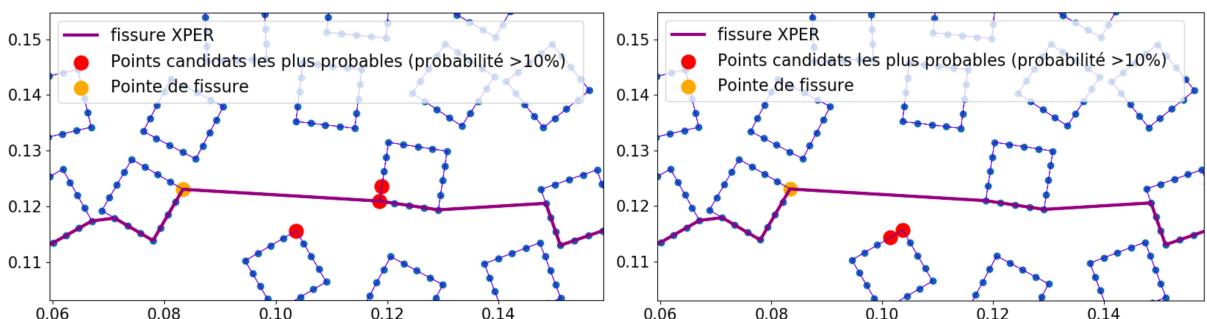


FIGURE 3.6 – Étude de l'influence du terme d'interaction dans le modèle pour la configuration F2, à gauche le comportement du modèle avec interaction et à droite le comportement du modèle sans interaction

Dans la configuration F2 (Figure 3.6), le terme d'interaction permet d'augmenter la potentialité des points plus éloignés mais situés dans une direction proche de la direction de mode I. On retrouve ce type de résultat sur la Figure 3.7 où la fissure a une probabilité non négligeable de rester sur le même granulat ou de le quitter, ce qui n'est pas le cas avec le modèle sans interaction qui contraint la fissure à suivre le même granulat.

Le modèle avec interaction est suffisamment flexible pour ne pas privilégier

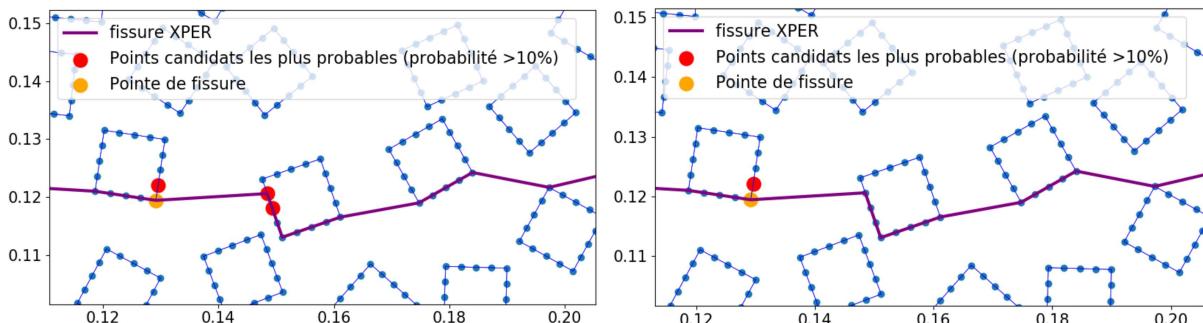


FIGURE 3.7 – Étude de l'influence du terme d'interaction dans le modèle pour la configuration F1, à gauche le comportement du modèle avec interaction et à droite le comportement du modèle sans interaction

systématiquement les points situés dans la direction de mode I. En fonction de la configuration locale des granulats, c'est le terme de distance qui peut dominer et conduire à sélectionner des points sur le granulat le plus proche (Figure 3.8). Dans ce cas, il n'y a aucune différence avec le comportement prédit par le modèle sans interaction.

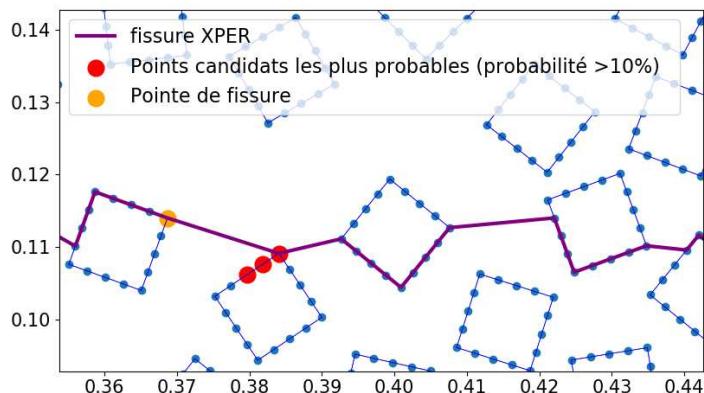


FIGURE 3.8 – Étude de l'influence du terme d'interaction dans le modèle pour la configuration F2. Cas où les modèles avec et sans interaction donnent les mêmes résultats

Précision de la réalisation médiane et incertitude de prédiction

Nous nous intéressons ici à la comparaison de la fissure XPER avec la réalisation médiane en intégrant l'incertitude de prédiction fournie par le modèle. La quantification de l'incertitude s'appuie plus précisément sur l'estimation d'une région de confiance des prédictions à partir d'évaluations ponctuelles de percentiles. Cela nécessite d'abord une paramétrisation de chaque trajectoire prédite issue des M réalisations. Dans notre travail, la

fissure est initialisée sur le bord gauche de la microstructure et se propage jusqu'à la rupture de la microstructure (i.e. jusqu'au bord droit). On pose L la largeur de la microstructure et l sa hauteur. Par conséquent, si l'on considère le système de coordonnées cartésiennes dont l'origine se situe dans le coin inférieur gauche de la microstructure, la $k^{\text{ième}}$ trajectoire prédictive peut être paramétrée par $(x^1, h_E^k(x^1))$ où $h_E^k : [0, L] \rightarrow [0, l]$ est une fonction linéaire par morceaux. Si $(x_{i,k}^{E,1}, x_{i,k}^{E,2})$ désigne les coordonnées dans le système cartésien du point $x_{i,k}^E$ situé sur la $k^{\text{ième}}$ réalisation, cette fonction s'écrit :

$$\forall x^1 \in [x_{i,k}^{E,1}, x_{i+1,k}^{E,1}], h_E^k(x^1) = \frac{x_{i+1,k}^{E,2} - x_{i,k}^{E,2}}{x_{i+1,k}^{E,1} - x_{i,k}^{E,1}}(x^1 - x_{i,k}^{E,1}) + x_{i,k}^{E,2}$$

La Figure 3.9 donne une illustration de cette paramétrisation pour un ensemble de réalisations de trajectoires.

Pour tout $x^1 \in [0, L]$, l'incertitude est quantifiée à partir de l'estimation des percentiles à 5 % et 95 % en exploitant l'échantillon $(h_E^1(x^1), \dots, h_E^M(x^1))$. Si $(\tilde{h}_E^1(x^1), \dots, \tilde{h}_E^M(x^1))$ est l'échantillon ordonné (ordre croissant), l'intervalle d'incertitude en x^1 est défini par $[\tilde{h}_E^{\lfloor 0.05M \rfloor}(x^1), \tilde{h}_E^{\lfloor 0.95M \rfloor}(x^1)]$. La région de confiance est alors l'enveloppe convexe de cet ensemble de points. L'incertitude de prédiction du modèle peut être quantifiée par le diamètre de cette région calculé comme la distance de Fréchet entre les courbes inférieure et supérieure définissant cette enveloppe.

Les Figure 3.10 et Figure 3.11 donnent deux exemples de réalisation médiane de fissure et de région de confiance ainsi qu'une comparaison avec la fissure XPER.

Pour compléter la comparaison, les Figure 3.12 et Figure 3.13 affichent l'écart basé sur la distance de Fréchet entre la simulation XPER et la fissure médiane ainsi que l'incertitude pour toutes les microstructures des ensembles d'apprentissage et test.

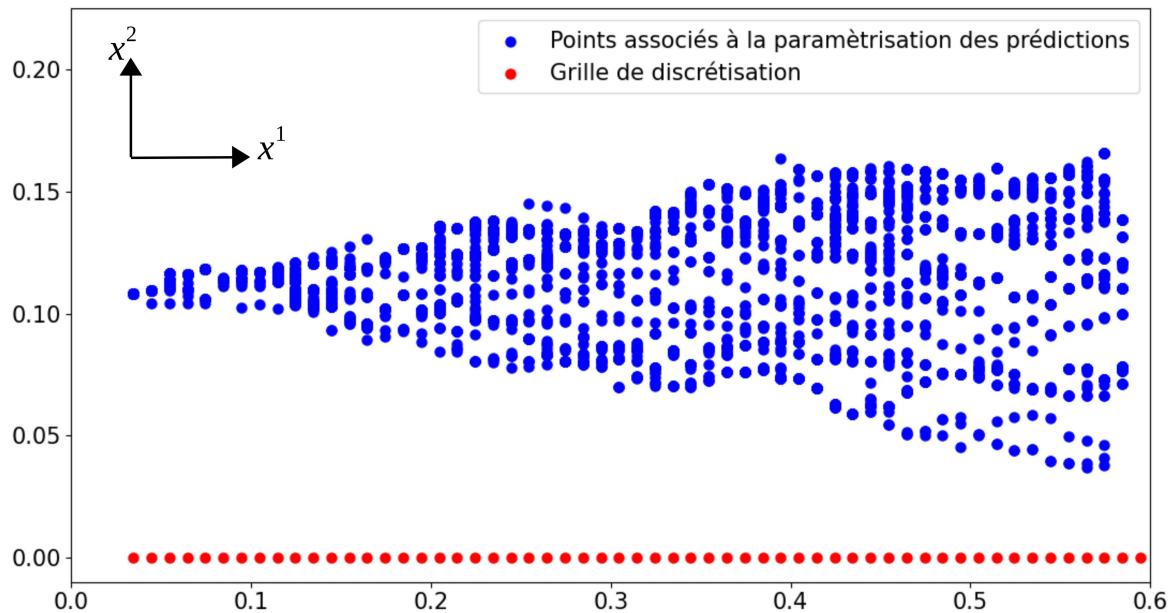


FIGURE 3.9 – Paramétrisation des trajectoires de fissure. Les points rouges correspondent à une grille de discréttisation dans la direction x^1 , les points bleus sont les couples $\{(x^1, h_E^k(x^1))\}_{k=1,\dots,100}$. Le premier point bleu à gauche correspond à l'initialisation de l'algorithme de prédiction des trajectoires. Il est imposé par la position de la préfissure sur le bord gauche de la microstructure (préfissure non représentée sur la figure)

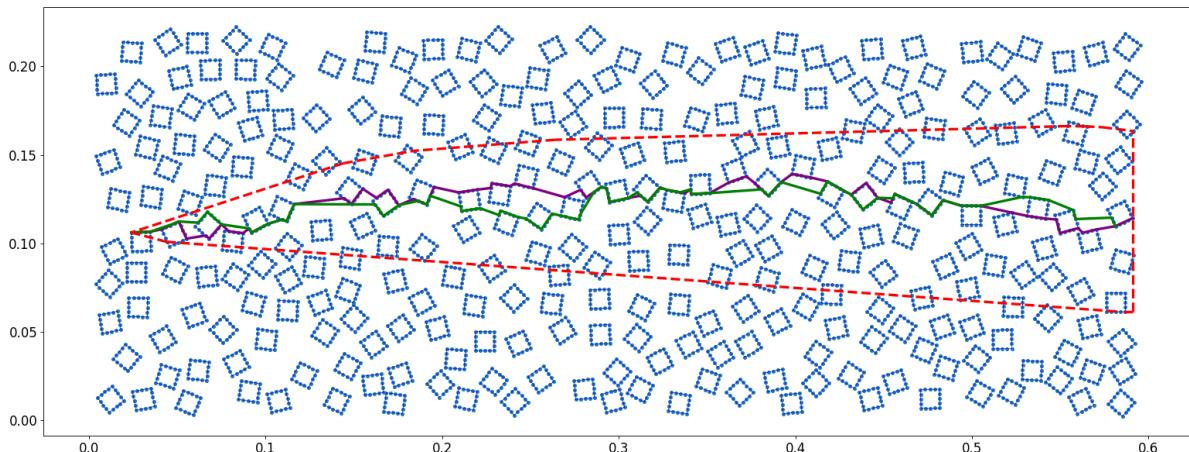


FIGURE 3.10 – Exemple de prédiction de trajectoire pour des granulats carrés (ensemble d'apprentissage) : simulation XPER (violet), fissure médiane (vert), région de confiance (rouge)

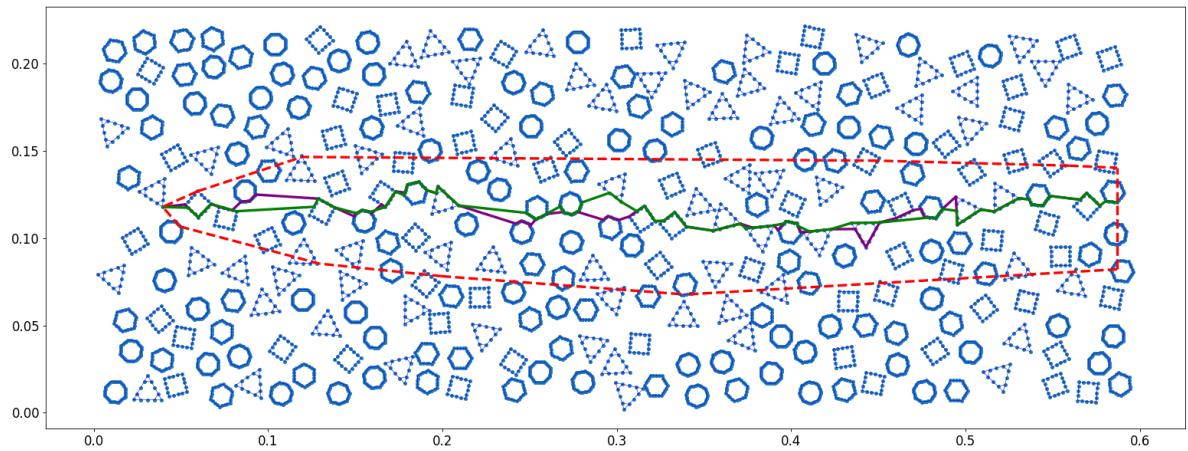


FIGURE 3.11 – Exemple de prédiction de trajectoire pour des granulats multiformes (ensemble d'apprentissage) : simulation XPER (violet), fissure médiane (vert), région de confiance (rouge)

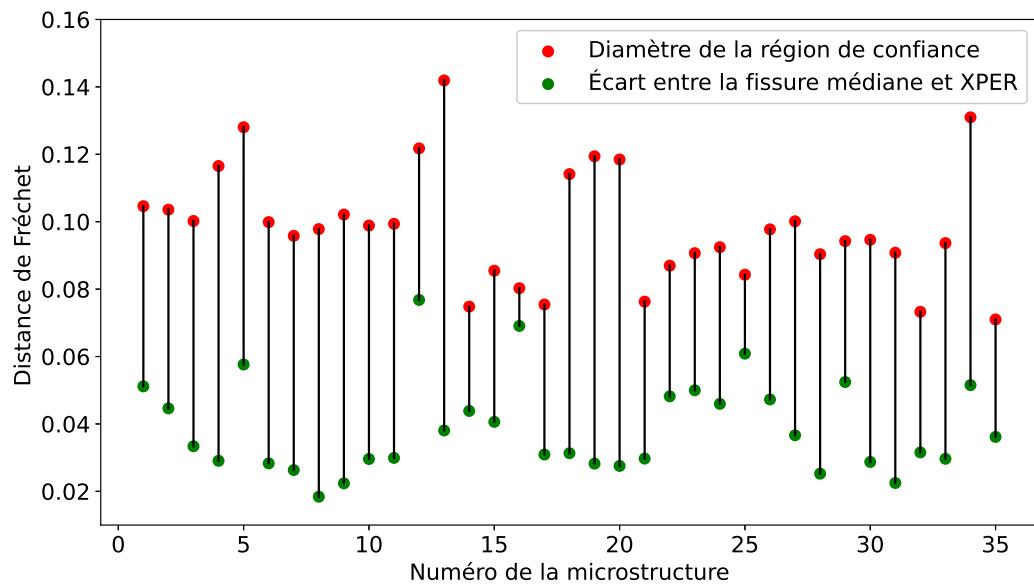


FIGURE 3.12 – Prédiction de la trajectoire de la fissure sur l'ensemble d'apprentissage (granulats carrés) : écart basé sur la distance de Frechet entre la fissure médiane et la simulation XPER (vert), diamètre de la région de confiance (rouge)

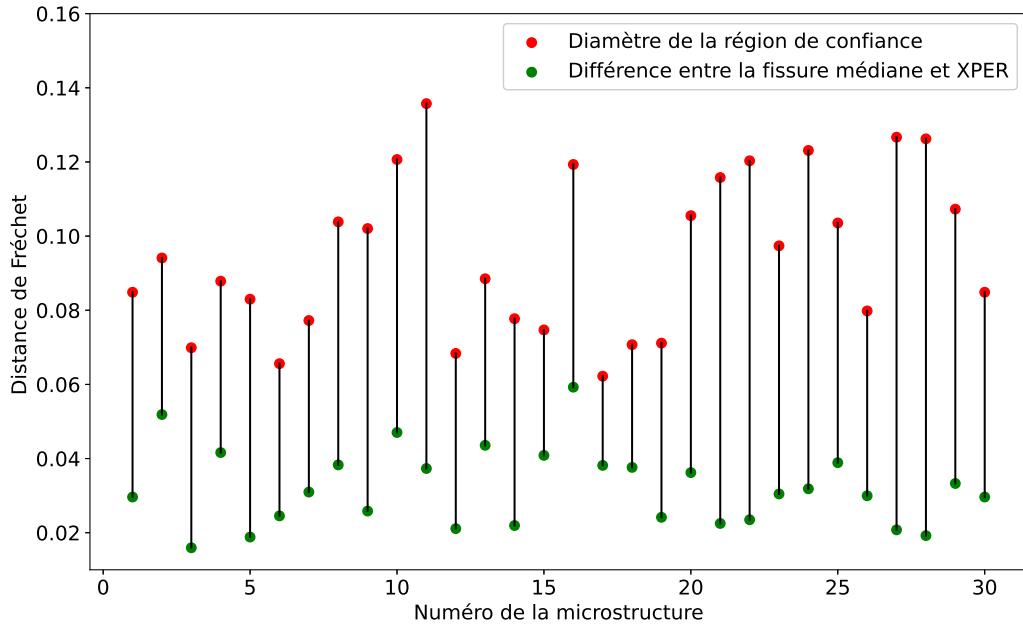


FIGURE 3.13 – Prédiction de la trajectoire de la fissure sur l’ensemble test (granulats multiformes) : écart basé sur la distance de Fréchet entre la fissure médiane et la simulation XPER (vert), diamètre de la région de confiance (rouge)

Les Figure 3.10 et Figure 3.11 correspondent respectivement aux microstructures 31 et 28 sur ces graphiques. Il en ressort que l’écart reste toujours inférieur à l’incertitude. Même si l’écart est toujours du même ordre de grandeur, on observe toutefois des situations où la précision de la prédition médiane est réduite par rapport aux deux situations présentées sur les Figure 3.10 et Figure 3.11. Les Figure 3.14 et Figure 3.15 fournissent les prédictions associées aux plus gros écarts sur l’ensemble d’apprentissage et test. Cette perte de précision peut s’expliquer par la présence de configuration locale particulière qui offre deux points candidats de même probabilité à être atteints par la fissure (exemple en abscisse $x^1 \approx 0.17$ sur la Figure 3.14 et $x^1 \approx 0.05$ sur la Figure 3.15). Notre modèle étant probabiliste, chacun de ces deux points est donc atteint par plusieurs fissures prédites de l’ensemble des réalisations. Il n’est donc pas surprenant que pour certaines microstructures comme celles de la Figure 3.14 et de la Figure 3.15, la fissure médiane ne corresponde pas au même choix local que la fissure XPER. On note toutefois qu’après cette bifurcation, la trajectoire prédite reste en accord avec la direction horizontale de propagation. De plus, quelle que soit la microstructure, la simulation XPER se situe toujours dans la région de confiance. Ce dernier résultat est observé pour toutes les microstructures des ensembles d’apprentissage et de test

(comparaisons non présentées par souci de clarté dans la description des résultats de l'étude).

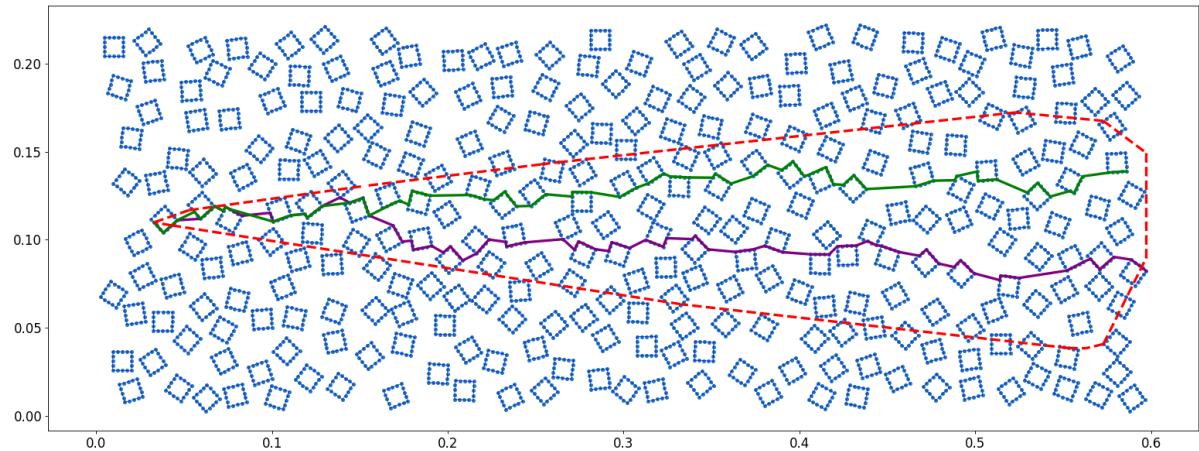


FIGURE 3.14 – Prédiction de la trajectoire associée à la précision la plus faible, cas des granulats carrés (ensemble d'apprentissage) : simulation XPER (violet), fissure médiane (vert), région de confiance (rouge)

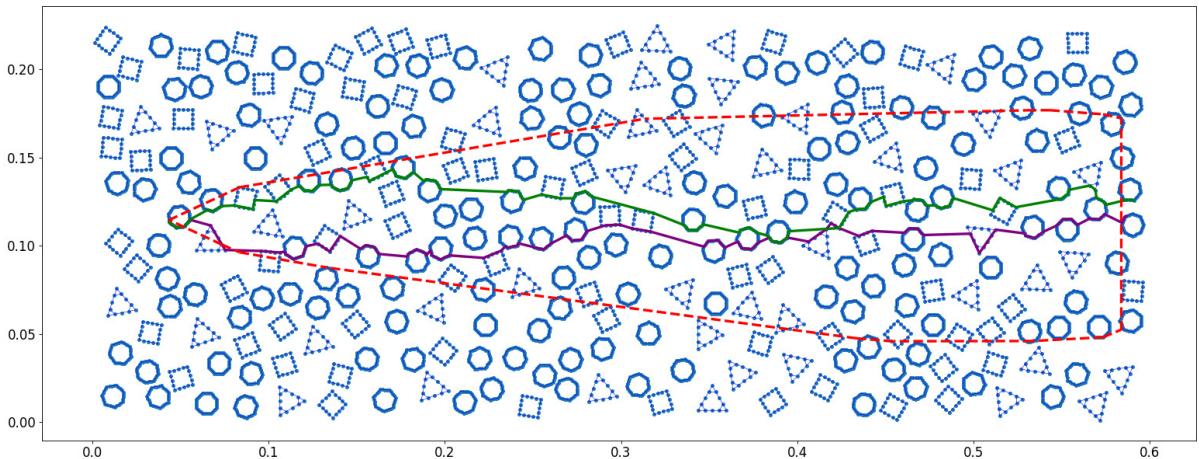


FIGURE 3.15 – Prédiction de la trajectoire associée à la précision la plus faible, cas des granulats multiformes (ensemble test) : simulation XPER (violet), fissure médiane (vert), région de confiance (rouge)

3.3 Prédiction de la tortuosité du chemin de fissure

Pour chaque microstructure, les tortuosités des $M = 100$ trajectoires prédictes sont calculées et nous nous concentrons sur leur valeur médiane et leur intervalle d'incertitude. Cet intervalle est obtenu à partir de l'estimation du percentile, de la même manière que dans la section précédente. L'étude numérique se limite ici à de la validation sur l'ensemble test de microstructures à granulats multiformes. La Figure 3.16 affiche les résultats pour chaque microstructure et une comparaison avec la tortuosité provenant de la simulation XPER est également effectuée. Les simulations XPER sont toujours incluses dans l'intervalle de confiance confirmant la bonne performance du modèle en terme de validation sur des géométries de granulats plus complexes.

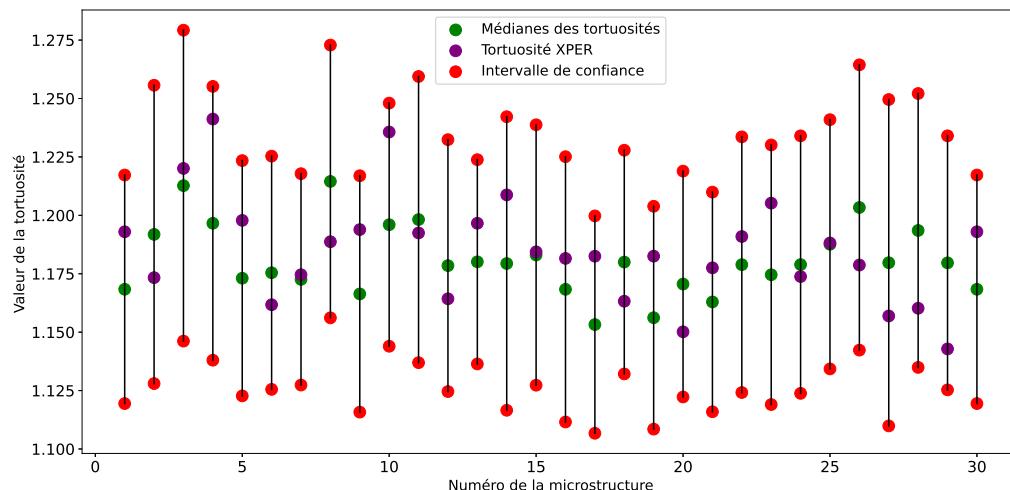


FIGURE 3.16 – Prédiction de la tortuosité sur l'ensemble test (granulats multiformes) : simulation XPER (violet), tortuosité médiane (vert), intervalle d'incertitude (rouge)

Il est également important de garder à l'esprit que le modèle de prédiction fournit plus d'informations qu'une médiane et un intervalle de confiance. Il permet de tracer l'histogramme de la tortuosité pour chaque microstructure (Figure 3.17).

Cette quantité permet d'avoir accès à la répartition des valeurs de la tortuosité à l'intérieur de son intervalle de variation. Elle fournit en particulier une estimation de la probabilité que la tortuosité appartienne à un sous-intervalle de variation d'intérêt ou dépasse un seuil fixé. Ce type d'informa-

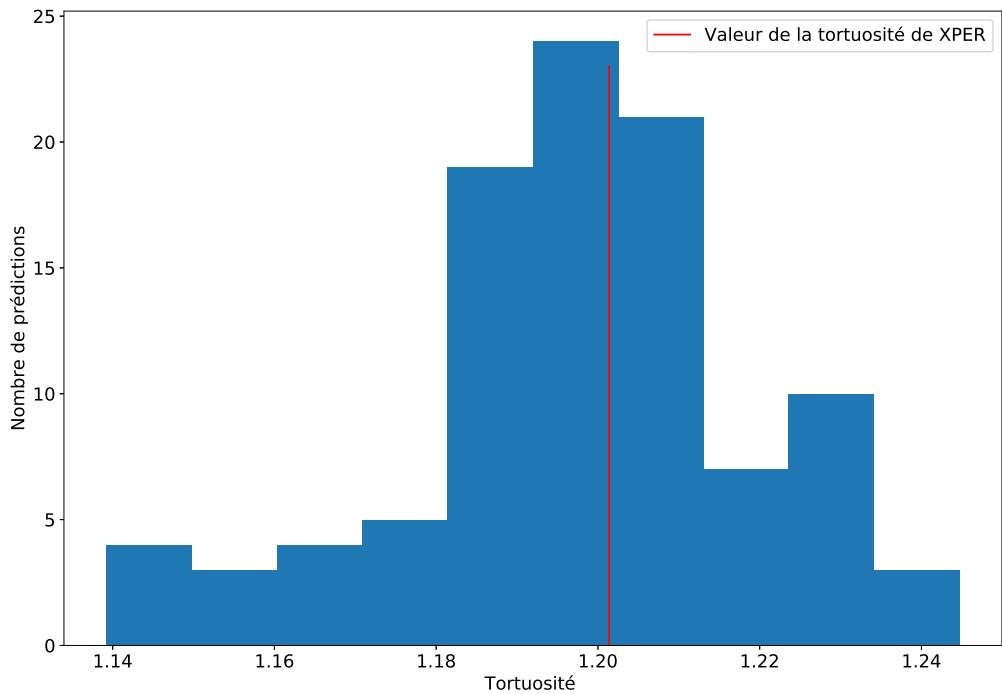


FIGURE 3.17 – Histogramme de la tortuosité pour une microstructure de l’ensemble test

tion est pertinent dans une démarche de planification d’expériences numériques où l’objectif est de faire des simulations ciblées. Ce point constituera l’une des perspectives développées à la fin de ce manuscrit.

Enfin, la performance du modèle est étudiée en termes d’estimation de la densité de tortuosité en tenant compte de l’ensemble des microstructures. La Figure 3.18 montre que les prédictions issues de notre modèle permettent d’approcher la variabilité et la valeur la plus vraisemblable de la tortuosité XPER.

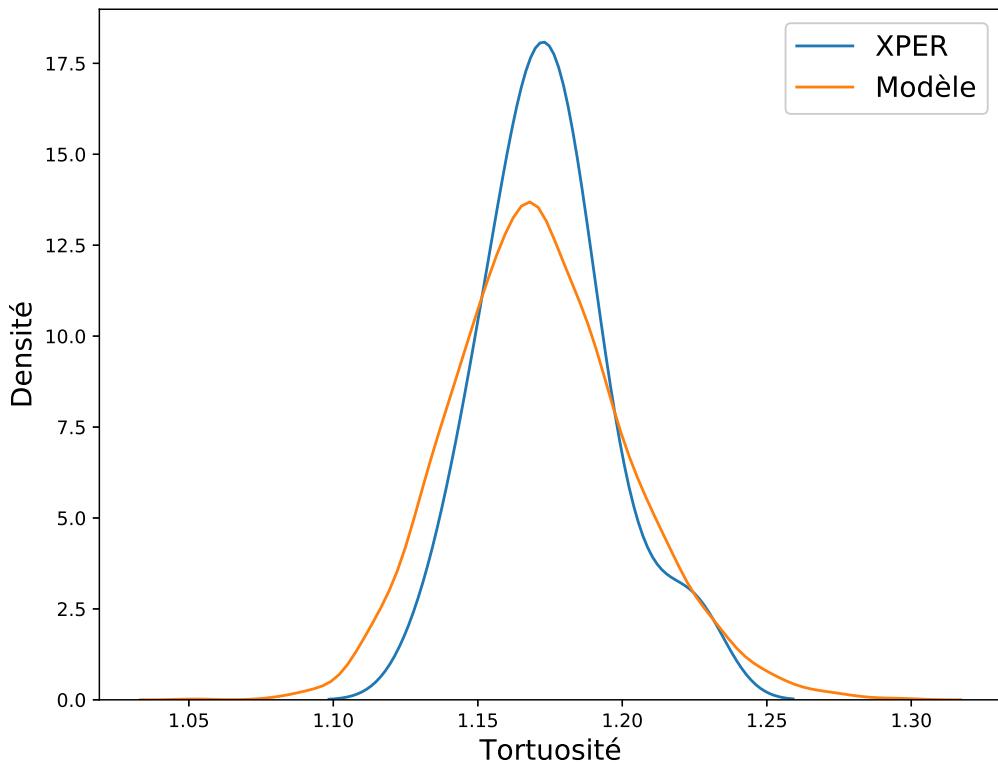


FIGURE 3.18 – Comparaison des densit s de tortuosit  construites   partir des simulations XPER (bleu) et des pr dicitions du mod le (orange) pour les microstructures avec des granulats multiformes (densit  obtenue par la m thode d'estimation par noyau gaussien)

3.4 Influence de la base d'apprentissage

Dans cette section, on propose d' tudier l'influence de la base d'apprentissage sur les pr dicitions associ es   l'ensemble test avec granulats multiformes. Pour cela, on consid re des ensembles d'apprentissage de 35 microstructures avec granulats pentagonaux ou octogonaux num riquement fissur es par XPER dans les m mes conditions que celles de la section 1.1.5. Les param tres du mod le de pr dicition sont   nouveau optimis s par l'algorithme BFGS.

La Figure 3.19 et la Figure 3.20 donnent les r sultats relatifs   la construction de la fissure m diane et   l'incertitude de pr dicition pour les trois types d'ensembles d'apprentissage.

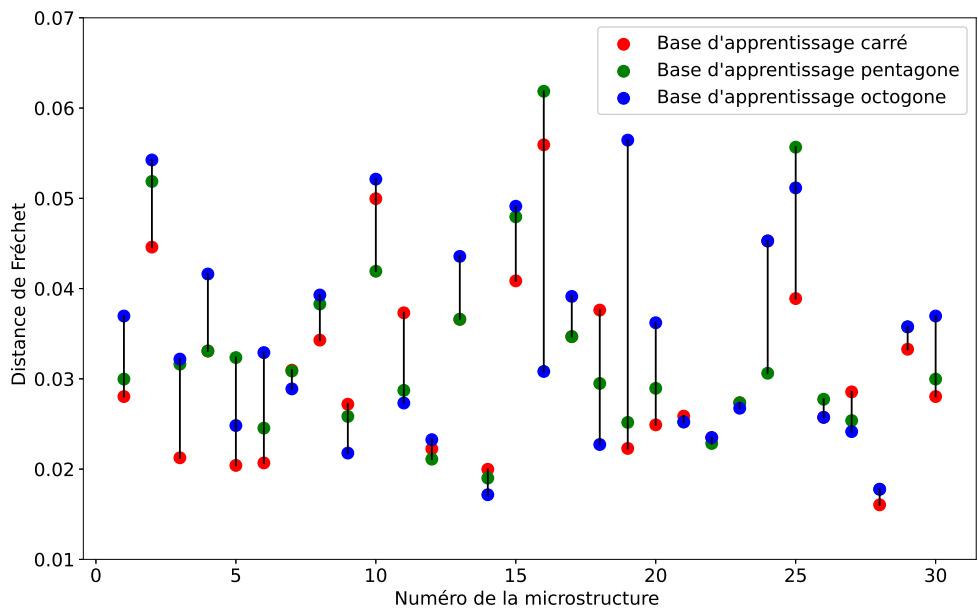


FIGURE 3.19 – Comparaison des distances de Fréchet entre la fissure médiiane et la fissure XPER pour différentes bases d'apprentissage

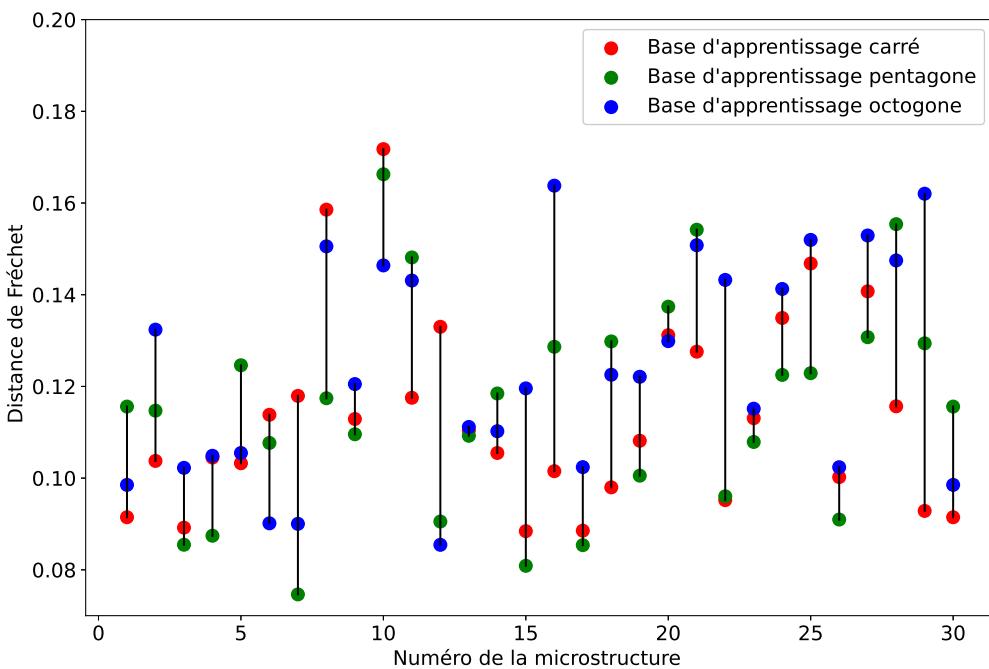


FIGURE 3.20 – Comparaison des diamètres de la région de confiance de prédiction pour différentes bases d'apprentissage

Il en ressort que c'est la base avec granulats carrés qui conduit à la distance entre la fissure médiane et le calcul XPER la plus faible pour le plus grand nombre de microstructure. De plus, l'incertitude de prédiction est du même ordre de grandeur pour les 3 bases. La Table 3.4 renseigne sur la proportion de fissures XPER contenues dans l'enveloppe de prédiction. On remarque que la fissure XPER n'est pas toujours contenue dans la région de confiance quand les bases avec granulats pentagones et octogones sont utilisées.

Sur les Figure 3.21 et Figure 3.22, on s'intéresse aux performances en terme de prédiction de la tortuosité.

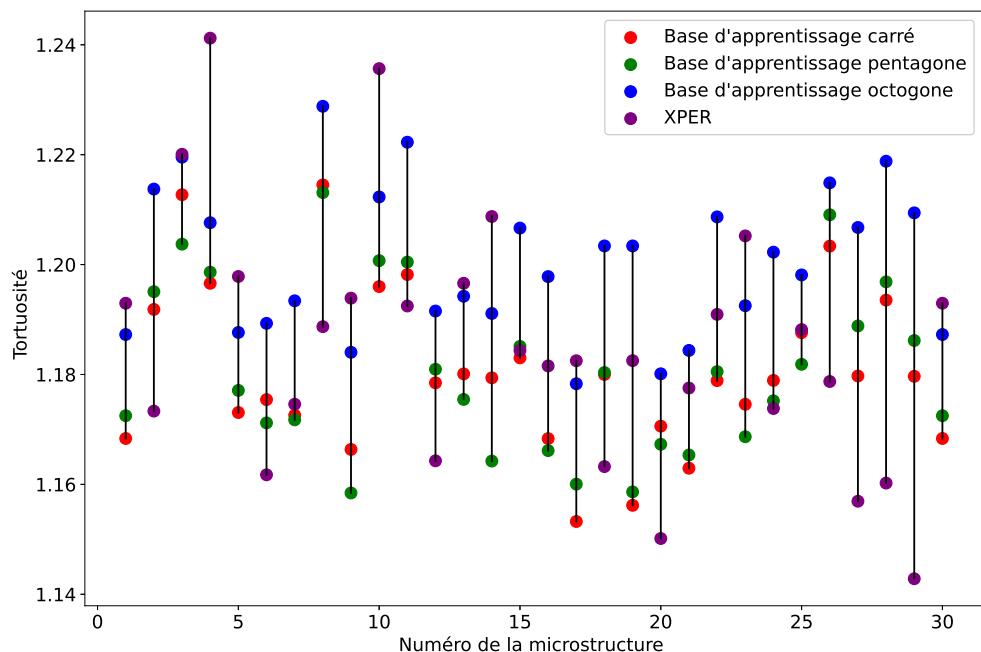


FIGURE 3.21 – Comparaison des tortuosités médianes obtenues pour différentes bases d'apprentissage

Les formes carré et octogone conduisent aux écarts les plus faibles entre les tortuosités médianes et les tortuosités XPER. Il est important de noter que la tortuosité médiane associée à l'octogone est toujours la plus élevée. En effet, l'octogone, étant la forme avec le plus de cotés, elle présentera moins d'angles élevés par rapport aux carrés et pentagones. Il en résulte que l'apprentissage pénalisera moins le fait de longer le granulat même au prix d'un angle fort d'où une tortuosité qui est plus susceptible de prendre des valeurs élevées. Par ailleurs, on peut remarquer que la tortuosité XPER est ici toujours contenue dans l'intervalle d'incertitude quelle que soit la forme étudiée (Table 3.4).

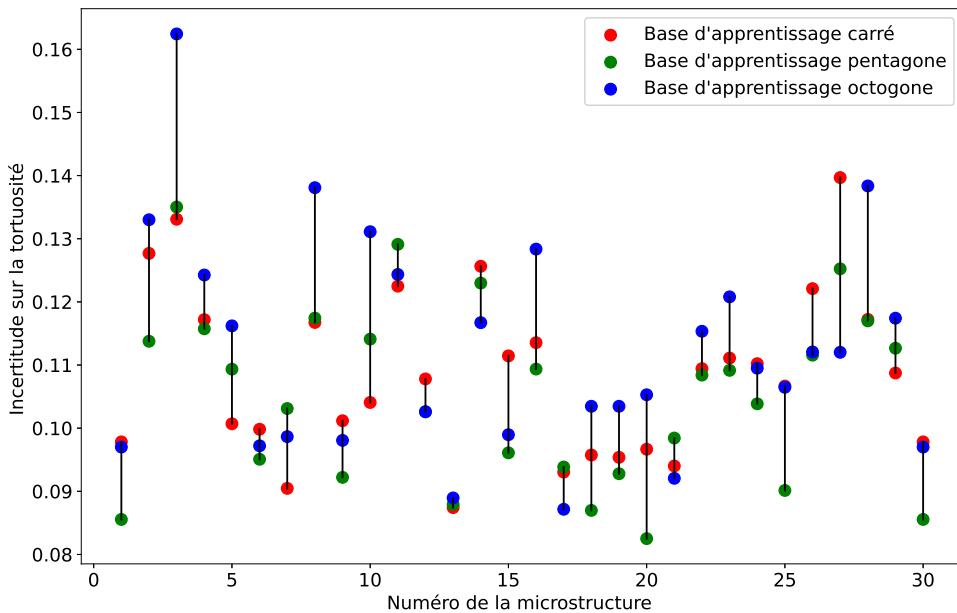


FIGURE 3.22 – Comparaison des largeurs de l'intervalle d'incertitude associé à la tortuosité obtenues à partir de différentes bases d'apprentissage

Enfin, la Table 3.5 montre peu d'influence de la base d'apprentissage sur la moyenne des tortuosités médianes et l'écart-type associé quand toutes les microstructures sont prises en compte.

Forme des granulats	Carré	Pentagone	Octogone
Fissure XPER	100%	84%	92%
Tortuosité XPER	100%	100%	100%

TABLE 3.4 – Proportion de microstructures pour lesquelles le calcul XPER est compris dans la région de confiance/l'intervalle d'incertitude estimé(e) à partir des différentes bases d'apprentissage

	Moyenne	Écart-type
Base apprentissage carré	1.17	0.03
Base apprentissage pentagone	1.17	0.03
Base apprentissage octogone	1.19	0.03
XPER	1.17	0.02

TABLE 3.5 – Moyenne et écart-type des tortuosités médianes selon les différentes bases d'apprentissage et comparaison avec la tortuosité XPER

Conclusion

Les performances du nouveau modèle de prédiction ont été évaluées sur l'ensemble d'apprentissage (microstructures à granulats carrés) et de test (microstructures à granulats multiformes).

L'estimation des paramètres du modèle a d'abord été étudiée et sa stabilité par rapport au nombre de microstructures de l'ensemble d'apprentissage invertiguée. Il est apparu que l'estimation se stabilise rapidement, avec un coefficient de variation inférieur à 2% pour la majorité des paramètres dans le cas d'un ensemble à 33 microstructures.

Les performances du modèle ont ensuite été analysées sur la base de l'évaluation de trois éléments :

- la fissure médiane qui peut être exploitée pour approcher la fissure unique simulée par le code de calcul déterministe,
- une région de confiance représentée par une enveloppe convexe estimant la zone où la fissure peut se propager,
- une tortuosité médiane et un intervalle d'incertitude de prédiction donnant accès à des grandeurs mécaniques d'intérêt.

Cette analyse a montré la cohérence entre les informations fournies par le modèle et les fissures simulées par le code XPER (proximité entre construction médiane et simulation, simulation contenue dans la région/l'intervalle de confiance/d'incertitude).

Enfin, la dernière étude a concerné l'influence de la base d'apprentissage sur la prédiction fourni par le modèle. Pour cela, plusieurs formes de granulats ont été considérées. Il en est ressorti que la forme des granulats a une influence non négligeable sur la précision de la prédiction et l'incertitude associée. De plus, c'est la base avec granulats carrés qui conduit aux meilleures performances.

Chapitre 4

Application

Cette section est dédiée à l'étude de la fissuration d'un essai de poutre en flexion trois points. Il s'agit ici d'appliquer le modèle probabiliste développé à la section 2.3 à un essai standard dans l'étude des matériaux cimentaires. Ce modèle nécessite une information mécanique locale pour déterminer le chemin de fissuration, il s'agit de la direction de propagation. Il est proposé ici d'obtenir cette quantité en couplant le modèle probabiliste à un code mécanique, le logiciel Eléments Finis Cast3M [5, 72]. Le calcul Eléments Finis[73] est réalisé sur une structure élastique et homogène.

La validation de la prédiction issue du couplage est effectuée en réalisant une comparaison avec le résultat numérique obtenu avec XPER via les outils développés à la section 3.2. Par ailleurs, le gain de temps de calcul est souligné. Enfin, les limitations de la démarche et quelques pistes pour y remédier sont présentées.

4.1 Poutre en flexion trois points

L'application consiste en une poutre bidimensionnelle constituée d'une matrice en mortier et de granulats soumise à une flexion trois points. La matrice et les granulats sont considérés élastiques et les granulats ne sont pas fissurables. Une pré-fissure est décentrée et la structure est soumise à un déplacement imposé sur le milieu de la frontière supérieure (voir Figure 4.1). Les dimensions et les caractéristiques géométriques de la structure sont résumées dans la Table 4.1. Les granulats sont choisis de type multiforme (carré, pentagone, octogone et hexagone) et sont répartis aléatoirement avec une fraction volumique totale de 25% répartie en 7% de carrés, 6% d'octogones, 6% pentagones et 6% hexagones (voir Figure 4.2). Il y a environ 50 granulats dans la hauteur de l'éprouvette, leur taille caractéristique

est d'environ 5mm.

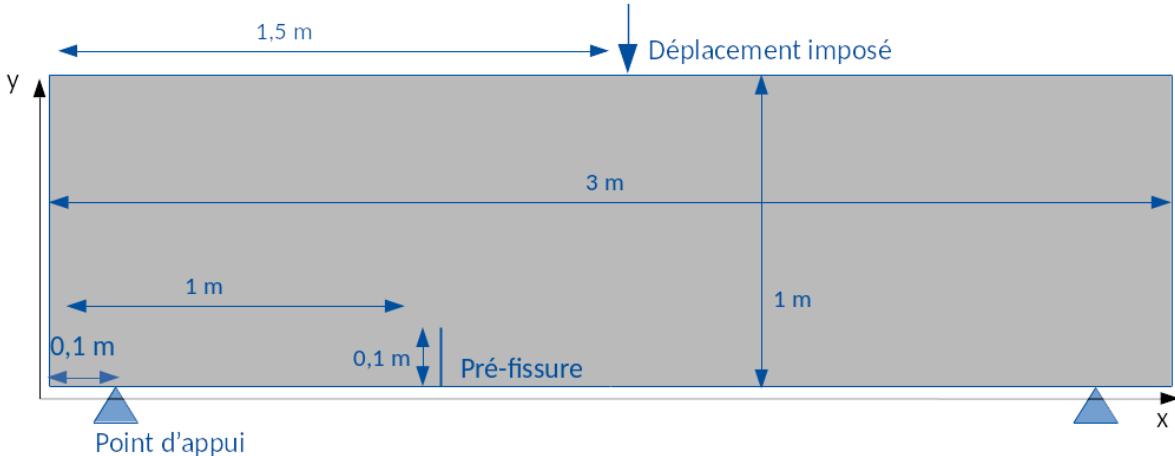


FIGURE 4.1 – Poutre en flexion trois points avec fissure décentrée

Largeur x Hauteur (m^2)	3×1
Position du déplacement imposé (m)	(1.5, 1)
Position pré-fissure (m)	(1, 0)
Longueur pré-fissure (m)	(0.1)
Positions des points d'appui (m)	(0.1, 0)

TABLE 4.1 – Poutre en flexion trois points : caractéristiques géométriques

Dans un premier temps et afin de valider la démarche, la fissuration de ce cas d'étude est simulée avec le logiciel XPER. Les paramètres mécaniques et cohésifs sont identiques à ceux de la section 1.1.5, décrits dans la Table 1.1 et la Table 1.2. Les paramètres numériques sont résumés dans la Table 4.2.

Nombre de mailles	1 281 257
Nombre de processeurs	81
Temps CPU Total (h)	$\simeq 200\ 000$

TABLE 4.2 – Poutre en flexion trois points : paramètres numériques

Les Figure 4.2 et Figure 4.3 montrent respectivement le faciès de rupture et un zoom de la zone d'intérêt. La fissure est influencée d'une part par la sollicitation et, d'autre part, localement macroscopiquement par la micro-structure (les granulats).

Par la suite, ces deux influences sont prises en compte à l'aide d'un couplage entre le modèle probabiliste (influence des granulats) et un code mécanique Eléments Finis (influence de la sollicitation mécanique).

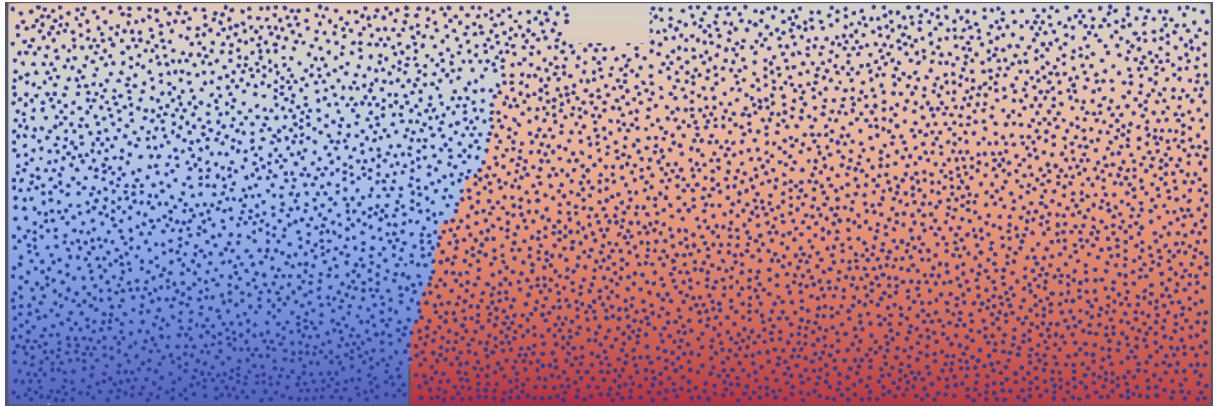


FIGURE 4.2 – Poutre en flexion trois points : faciès de rupture obtenu avec XPER

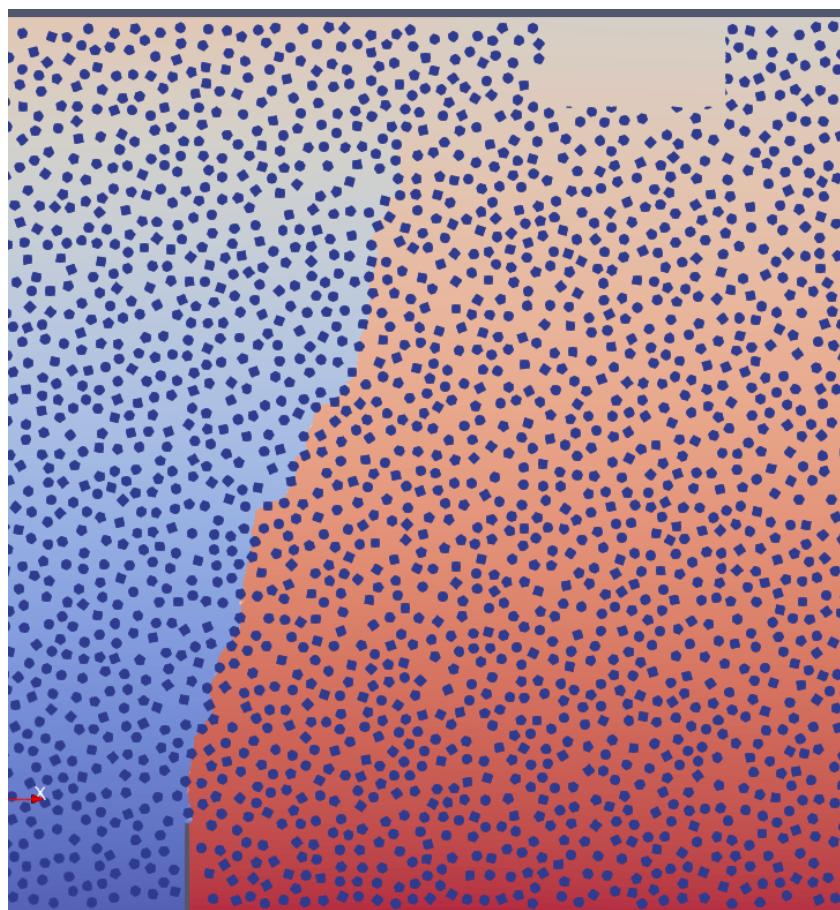


FIGURE 4.3 – Poutre en flexion trois points : zoom dans la zone d'intérêt

4.2 Couplage entre le modèle probabiliste et un code mécanique Éléments Finis

L'approche proposée consiste en un processus itératif :

1. pour une structure considérée comme homogène, la direction princi-

pale de propagation en pointe de fissure est évaluée par un calcul de structure aux éléments finis,

2. cette direction de propagation permet de faire propager la fissure via le modèle probabiliste au travers d'une microstructure sous-jacente hétérogène.

La première étape est une étape pour déterminer la direction de la fissure, la deuxième étape est une étape de prédiction de la propagation de fissure. Le calcul mécanique permet de déterminer localement les directions de propagation de la fissure et ainsi d'identifier les angles permettant d'orienter le champ de vision du modèle probabiliste. La détermination de cette orientation locale de la fissure repose sur la recherche des valeurs propres du tenseur des contraintes en pointe de fissure (directions principales). Dans cette section, la détermination de l'angle de propagation, sa mise en œuvre numérique et le couplage sont détaillés. Par ailleurs, cette démarche repose sur l'introduction d'un paramètre additionnel : la distance selon laquelle se propage localement la fissure avec le modèle probabiliste sans réévaluer la direction principale de propagation. Les résultats obtenus sont comparés avec la simulation obtenue à l'aide d'XPER.

4.2.1 Détermination de l'orientation de propagation locale de la fissure

La détermination de la direction de propagation principale en pointe de fissure repose sur le calcul des directions principales du champ des contraintes associées aux contraintes principales notées σ_I , σ_{II} et σ_{III} . En particulier, la contrainte principale σ_I est associée à la propagation en mode I.

Les principales étapes de la mise en œuvre numérique sont décrites dans la suite.

Calcul des contraintes principales pour chaque point de Gauss. Les points de Gauss ayant une valeur propre σ_I positive sont conservés.

Définition d'un voisinage de mailles en pointe de fissure. L'estimation de la direction principale de contraintes en pointe de fissure doit se faire dans un voisinage de la pointe de fissure : ni trop loin pour conserver une sensibilité aux concentrations de contraintes, ni trop proche pour limiter les erreurs commises en élasticité linéaire en pointe de fissure par la méthode des éléments finis. Seuls les points de Gauss appartenant à ce voisinage sont considérés (Figure 4.4). Ce voisinage est choisi circulaire de

rayon interne 1mm (environ $1/5$ ème de la taille des granulats) et de rayon externe R . Ce rayon R est déterminé par une étude paramétrique qui est présentée dans une prochaine section. Sa dimension caractéristique doit être de l'ordre de grandeur de quelques granulats, soit environ 10cm .

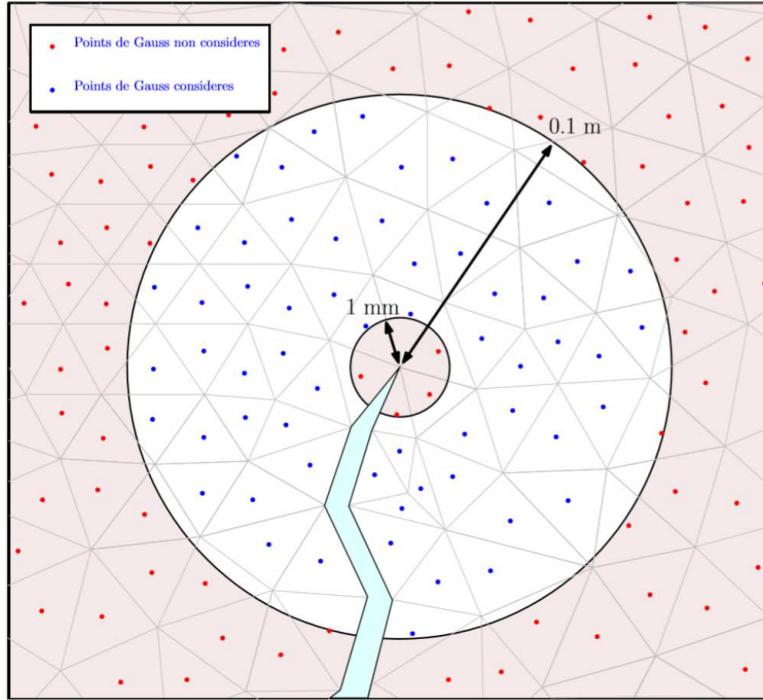


FIGURE 4.4 – Voisinage autour de la pointe de fissure dans lequel sont estimées les directions principales de contraintes [5]

Courbes d'iso-contraintes principales σ_I . Les courbes d'iso-contraintes principales σ_I , en forme d'"ailes de papillon", permettent de déduire la direction de propagation de fissure en milieu homogène. Cette direction correspond aux creux définis par les iso-courbes (voir Figure 4.5). Une infinité de courbes d'iso-contraintes pouvant être tracée, seules certaines valeurs sont retenues. Proche de la pointe de fissure, la contrainte évolue en $\frac{1}{\sqrt{2\pi r}}$ où r désigne la distance à la pointe de fissure. Ainsi, un seuil de contrainte σ_{seuil} est défini tel que : $r = \frac{1}{2\pi\sigma_{seuil}^2}$ avec $r \in [10^{-3}, R]$. Pour chaque seuil, le point de Gauss le plus proche de la pointe de fissure dans le cône de centre la pointe de fissure, d'angle 90° et orienté vers la position de la sollicitation est retenu (point rouge sur Figure 4.6).

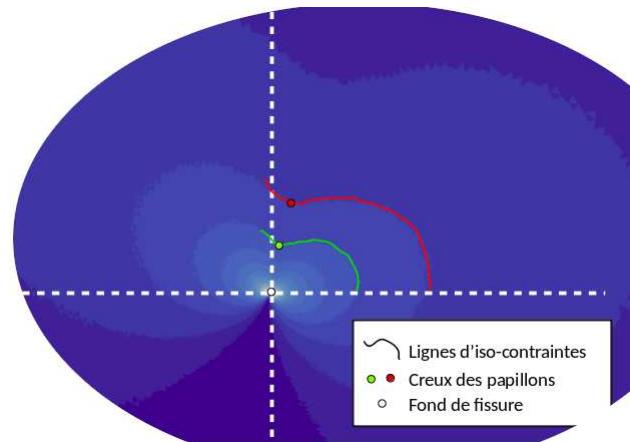


FIGURE 4.5 – Courbes d'iso-contraintes principales σ_I . Les creux des papillons correspondent aux points retenus pour déterminer la direction de propagation de la fissure

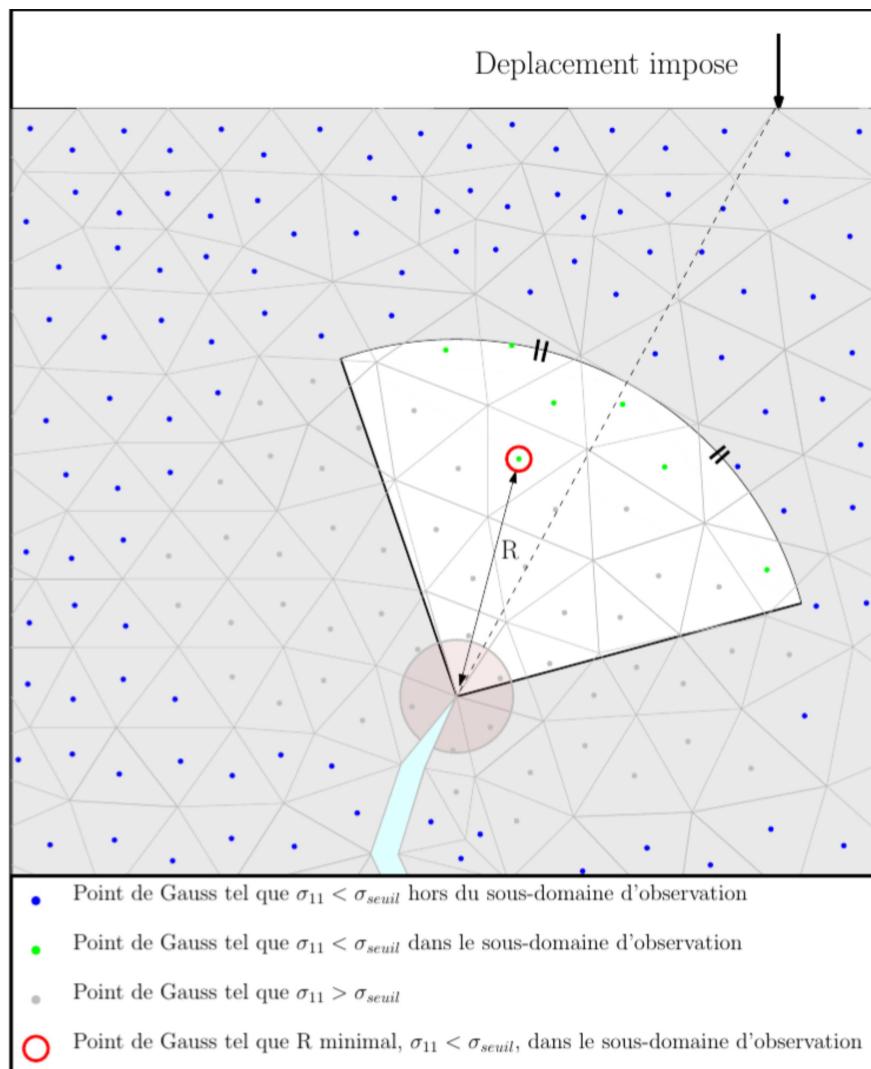


FIGURE 4.6 – Sélection des points de Gauss [5]

Estimation de l'angle de propagation de la fissure. Chaque angle entre la droite horizontale et la demi droite définie par la pointe de fissure et le point trouvé à l'aide des courbes d'iso-contraintes principales est calculé. L'angle de propagation correspond à la moyenne de ces angles dans le voisinage d'étude (Figure 4.7).

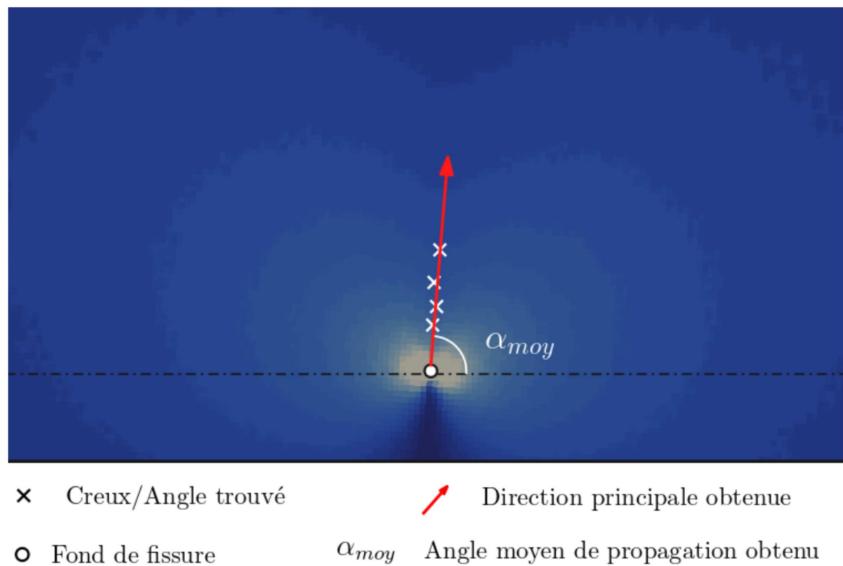


FIGURE 4.7 – Détermination de l'angle de propagation [5]

4.2.2 Mise en œuvre numérique à l'aide du logiciel Cast3M

La démarche numérique décrite dans la section 4.2.1 est mise en œuvre à l'aide du logiciel mécanique Cast3M [72].

Le calcul est réalisé dans le cadre de la mécanique élastique linéaire, sous l'hypothèse des petites perturbations et en déformations planes. L'objectif est la prise en compte de la sollicitation dans la propagation de la fissure. Le matériau est considéré homogène isotrope avec un module d'Young de $E = 30 GPa$ et un coefficient de Poisson de $\nu = 0.2$ [74]. La valeur de ces propriétés élastiques impacte la valeur des contraintes principales mais pas celles des directions principales de contraintes : la forme du champ de contrainte ne dépend pas des valeurs des coefficients d'élasticité. En particulier, utiliser des propriétés homogènes équivalentes à la microstructure sous-jacente n'apporterait rien ici dans la recherche de direction de propagation de la fissure. L'effet local des granulats est pris en compte dans l'étape de propagation par le modèle probabiliste.

La résolution numérique de cette étape de prédiction de direction de propagation de fissure s'effectue en plusieurs étapes :

Génération du maillage. A partir des données géométriques du problème (dimension de la structure, chargement, densité de maillage) et de la trajectoire de la fissure obtenue à partir du modèle probabiliste, le maillage est généré à l'aide du logiciel GMSH [6]. Les tailles de mailles sont données dans la Table 4.3. Cette étape nécessite un post traitement particulier car la fissure fournie par le modèle probabiliste est sans épaisseur. Sans cette épaisseur les points de la fissure sont géométriquement confondus et GMSH ne peut pas réaliser le maillage car il n'y a donc pas deux lèvres de fissure. C'est pourquoi on propose de re-créer cette épaisseur pour chaque point par la procédure 4.2.1 suivante illustrée par la Figure 4.8 tout en respectant le mode I. La Figure 4.9 montre le résultat obtenue sur GMSH.

Procédure 4.2.1. Soient x_i , x_{i-1} et x_{i+1} trois points de la fissure et E la largeur de l'épaisseur. On souhaite déterminer l'épaisseur associée à x_i soient deux points l'un à droite D_i et l'autre à gauche G_i , tout deux éloignés d'une distance $d = \frac{E}{2}$. On pose $A = x_i = (A_1, A_2)$, $B = x_{i+1}$ et $C = x_{i-1}$. On souhaite calculer la bissectrice D associée au sommet A du triangle quelconque ABC . On introduit B' tel que $\overrightarrow{AB'} = \frac{\overrightarrow{AB}}{\|\overrightarrow{AB}\|}$ et C' tel que $\overrightarrow{AC'} = \frac{\overrightarrow{AC}}{\|\overrightarrow{AC}\|}$. Ainsi $AB'C'$ forme un triangle isocèle et dans ce cas la médiatrice du segment $B'C'$ est également la bissectrice D issue du sommet A , par conséquent : $\forall M \in D$, $\overrightarrow{AM} \cdot \overrightarrow{B'C'} = 0$. On obtient ainsi l'équation de la bissectrice, et l'on pose son coefficient directeur t . Ainsi, on peut calculer les points de l'épaisseur associée le long de la bissectrice D :

$$G_i = \left(A_1 + \frac{-d}{\sqrt{1+t^2}}, A_2 + \frac{-d+t}{\sqrt{1+t^2}} \right)$$

$$D_i = \left(A_1 + \frac{d}{\sqrt{1+t^2}}, A_2 + \frac{d+t}{\sqrt{1+t^2}} \right)$$

Remarque 4.2.1. Afin de s'assurer de la bonne disposition des points d'épaisseur de chaque côté de x_i , on vérifie à leur création qu'il n'y pas d'intersection entre les droites $G_{i-1}G_i$ et $D_{i-1}D_i$. Si une intersection est détectée, on inverse la position des points D_i et G_i en reprenant la procédure 4.2.1 avec $d = -d$.

Cette procédure permet de conserver une épaisseur constante le long de la trajectoire mais également de respecter le mode I.

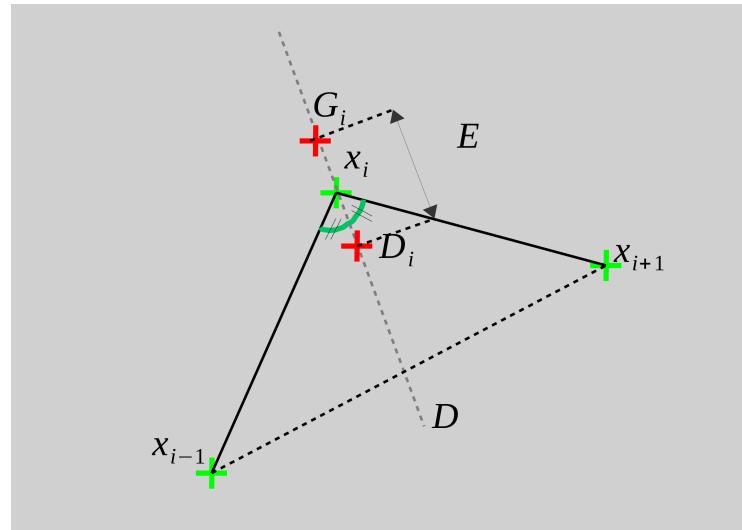


FIGURE 4.8 – Illustration de la procédure 4.2.1

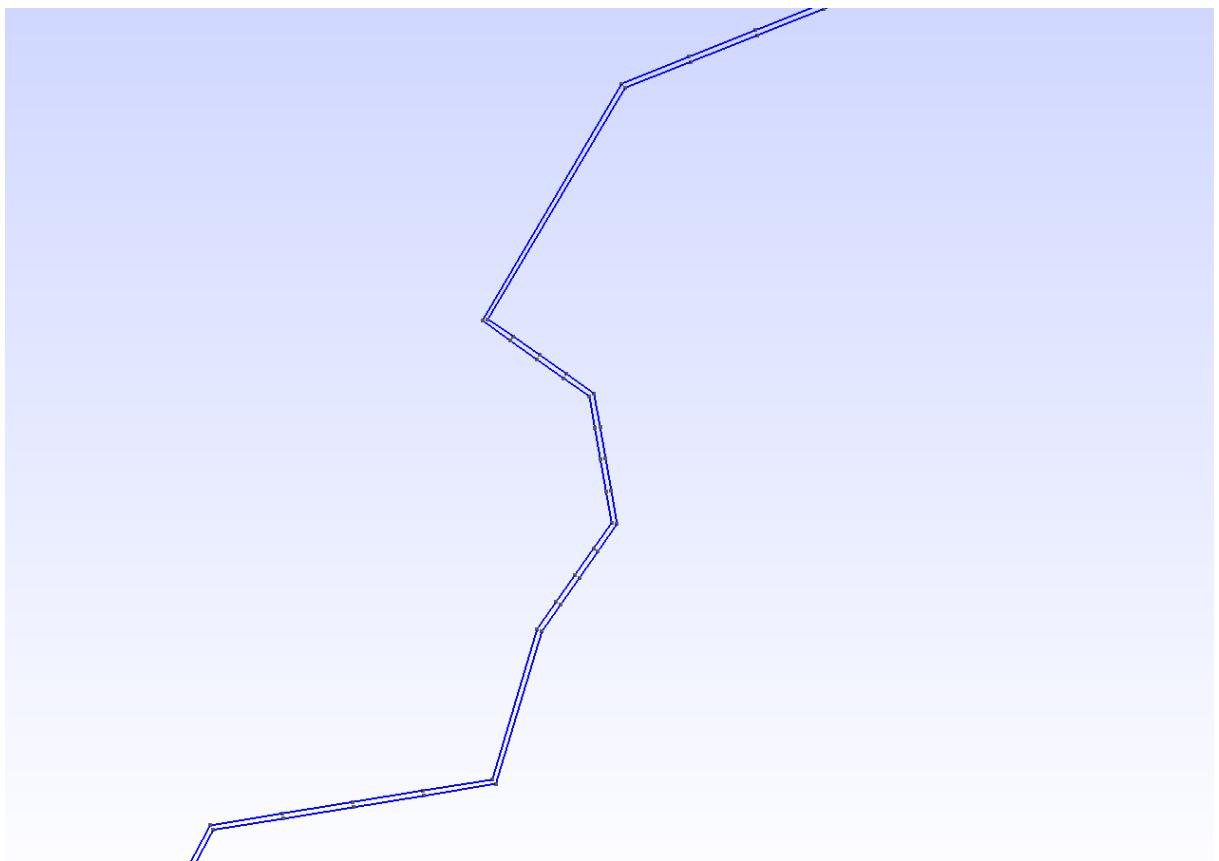


FIGURE 4.9 – Visualisation avec GMSH d'une portion de la fissure avec épaisseur

Le maillage est raffiné proche de la sollicitation et de la fissure. Les caractéristiques du maillage sont décrites dans la Table 4.3. Un exemple de maillage est montré dans la Figure 4.10 et un agrandissement en figure Figure 4.11.

Nombre total de mailles	20 466
Taille de maille(en mm)	0.1
Taille de maille autour de la fissure (en mm)	0.005

TABLE 4.3 – Caractéristiques du maillage

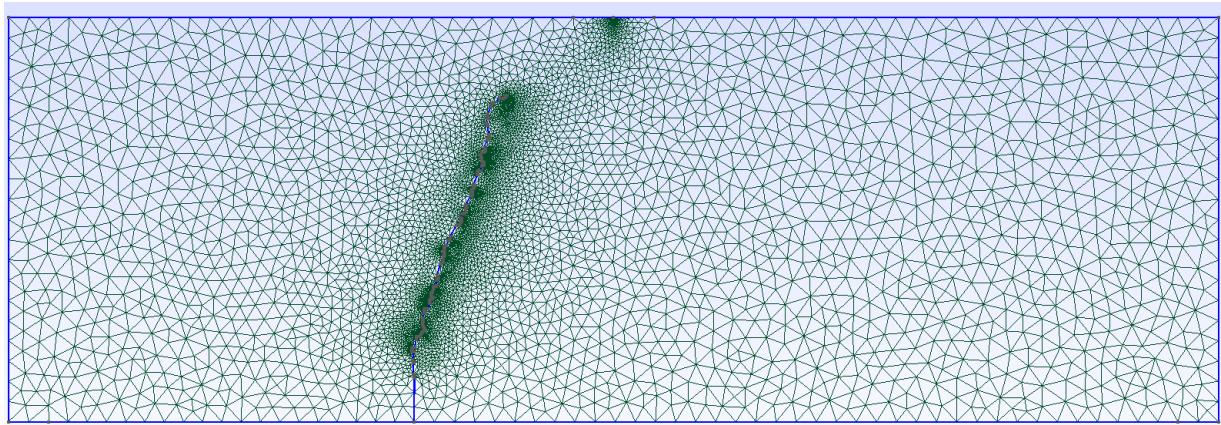


FIGURE 4.10 – Maillage avec GMSH [6] d'une microstructure fissurée

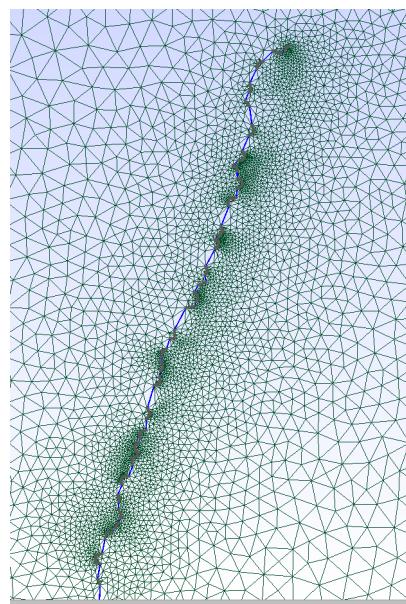


FIGURE 4.11 – Agrandissement du maillage avec GMSH [6] d'une microstructure fissurée

Le maillage. Un script Python permet d'écrire le .geo selon les règles précédentes puis de lancer le maillage avec GMSH afin de récupérer un fichier .unv transmis à Cast3M

La définition des lois de comportement et des hypothèses.

La résolution de l'équation de la statique : $\text{div}(\sigma) + F = 0$. La simulation numérique permet de calculer le champ de déplacements et de contraintes dans l'ensemble des mailles du domaine. La Figure 4.12 montre les champs de contraintes obtenus.

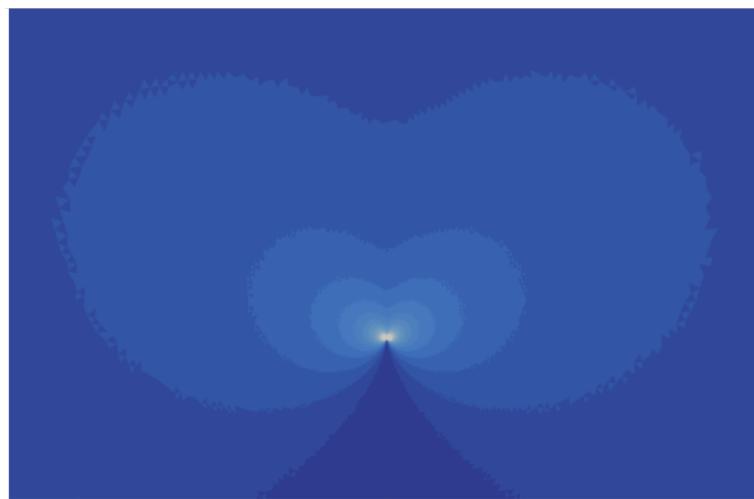


FIGURE 4.12 – Illustration des champs de contraintes principales σ_I en pointe de fissure

L'utilisation d'un opérateur de diagonalisation. Cet opérateur permet le calcul des valeurs propres de chacun des tenseurs des contraintes en chaque point de Gauss du domaine. Il permet, en particulier, de calculer la contrainte principale σ_I , première valeur propre du tenseur des contraintes et d'obtenir l'angle de la direction de propagation (voir section 4.2.1).

L'angle de propagation calculé permet de définir le champ de vision du modèle probabiliste comme le demi-plan perpendiculaire à cette direction de propagation de la fissure et situé en amont de la pointe de la fissure (voir définition 2.1.1).

Il s'agit maintenant de faire propager localement la fissure au sein du milieu hétérogène à l'aide du modèle probabiliste sur une certaine distance D avant de réévaluer un nouvel angle de propagation par le code mécanique. La distance de propagation D est un paramètre important du problème :

- le modèle probabiliste a réalisé son apprentissage à partir de micro-structures où la fissure rencontre en général environ 25 inclusions, D doit donc être assez grand pour prendre en compte cette statistique ;
- D doit être suffisamment petit pour permettre une réorientation fréquente de la fissure macroscopique.

Dans une prochaine section, on détaillera l'obtention d'une valeur optimale pour D ainsi que pour deux autres paramètres mécaniques : le rayon du voisinage et l'épaisseur de fissure.

4.2.3 Couplage

Le modèle probabiliste, à l'aide de la direction de propagation obtenue par simulation numérique, permet d'effectuer des réalisations de prédiction. Il s'agit ici de décrire le couplage entre le modèle probabiliste et le code mécanique.

La Figure 4.13 présente l'algorithme de couplage. Les différentes étapes de la procédure sont les suivantes :

1. La microstructure fissurée est maillée avec GMSH (Figure 4.10 et Figure 4.11)
2. À partir du maillage, un calcul mécanique sur un milieu homogène avec Cast3M permet d'obtenir la direction de propagation (Figure 4.7)
3. À partir de la direction de propagation, le modèle probabiliste détermine sur le milieu hétérogène une propagation de fissure soit une trajectoire de longueur D .
4. À partir de la nouvelle fissure, un nouveau maillage est généré.

Le processus se répète jusqu'à rupture de la microstructure. Un programme écrit en Python permet d'effectuer le couplage entre les différentes étapes.

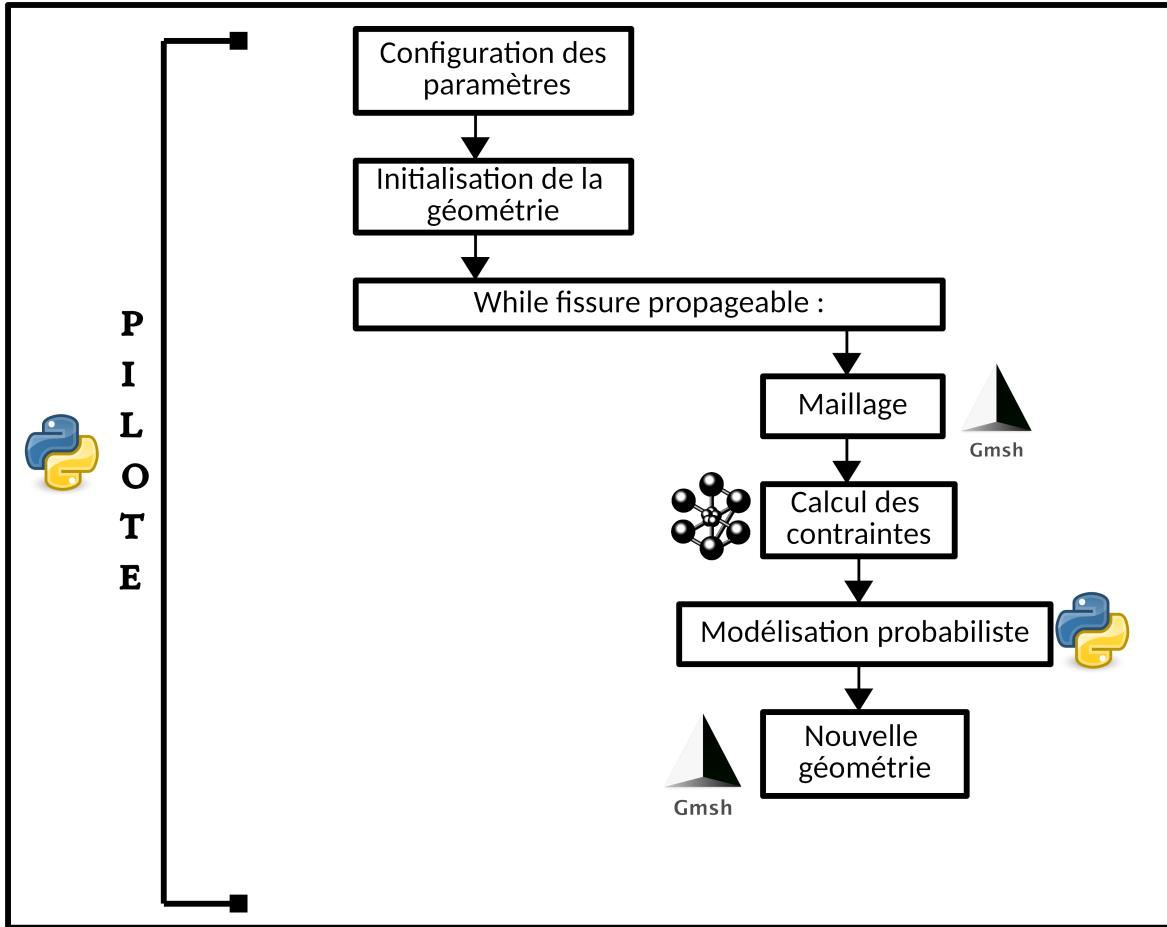


FIGURE 4.13 – Algorithme de couplage du code mécanique et du modèle probabiliste

4.2.4 Étude paramétrique

Dans la méthodologie présentée, trois paramètres sont déterminés par l'utilisateur :

1. le rayon du voisinage R pour déterminer les contraintes
2. l'épaisseur de fissure E
3. la distance de propagation D

Afin d'étudier leurs influences sur le résultat de la prédiction, plusieurs études paramétriques sont réalisées. L'objectif est donc de déterminer le meilleur triplet pour le matériau étudié, ici le béton. Les deux premiers paramètres sont de nature mécanique. Pour caractériser leurs impacts, il est nécessaire de fixer la valeur de la distance de propagation mais également de se baser sur le maximum des probabilités et non plus sur un tirage aléatoire pondéré. En fixant ces deux conditions, cela permet au modèle probabiliste d'avoir un comportement "déterministe" et ainsi d'identifier

distinctement les effets des deux paramètres mécaniques de nature déterministe. Ces deux paramètres ont uniquement un rôle sur la valeur de l'angle de propagation. On cherche donc à déterminer les valeurs qui permettent d'obtenir la meilleure cohérence avec l'orientation de la fissure XPER. Pour cela on compare les différentes fissures obtenues, en calculant leurs distances de Fréchet par rapport à XPER. Les résultats obtenus sont donnés par la Figure 4.14.

On constate que les plus petites distances semblent être obtenues pour un rayon du voisinage de $0.1m$. De plus, on remarque que pour l'épaisseur la plus grande $10^{-1}m$ la fissure est très éloignée de XPER quelle que soit le rayon du voisinage utilisé. C'est pourquoi cette valeur peut-être directement éliminée. La Table 4.4 et la Table 4.5 donnent la moyenne des distances respectivement pour l'ensemble des rayons et pour l'ensemble des épaisseurs de fissure (sans prendre en compte la valeur de l'épaisseur $10^{-1}m$). La moyenne la plus faible est donnée par le rayon $0.1m$ confirmant la tendance observée sur la Figure 4.14. Par ailleurs, on peut constater qu'en moyenne l'épaisseur de fissure ne semble pas impacter beaucoup la distance, le minimum étant atteint pour $10^{-2}m$.

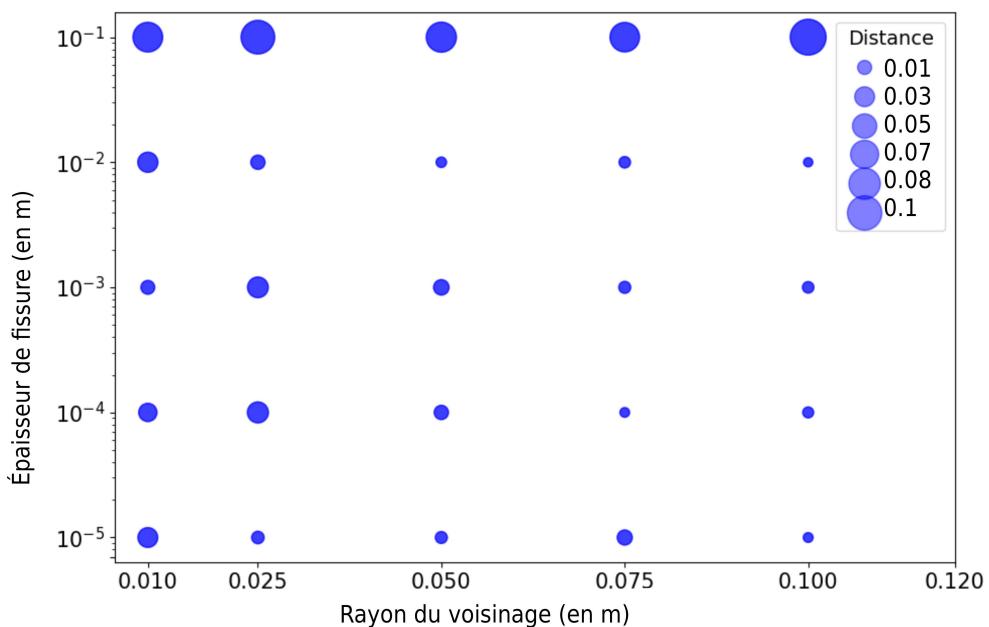


FIGURE 4.14 – Mesure de la distance de Fréchet entre la fissure prédictive et la fissure XPER en fonction du rayon du voisinage en mètre et de l'épaisseur de fissure en mètre. Chaque cercle représente, en fonction de sa taille, une distance par rapport à XPER. Le rayon et l'épaisseur sont donnés en mètres

Rayon du voisinage (en m)	0.01	0.025	0.05	0.075	0.1
Moyenne des distances	0.027	0.026	0.014	0.012	0.009

TABLE 4.4 – Étude de la moyenne des distances pour toutes les épaisseurs pour chaque rayon compris entre $0.01m$ et $0.1m$

Épaisseur de fissure (en m)	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
Moyenne des distances	0.017	0.020	0.019	0.016

TABLE 4.5 – Étude de la distance entre la fissure prédictive et XPER pour tous les rayons pour chaque épaisseur comprise entre $10^{-1}m$ et $10^{-4}m$

De cette première étude, les paramètres mécaniques les plus pertinents correspondent à un rayon de voisinage $R = 10cm$ et une épaisseur de fissure $E = 1cm$.

La seconde étude paramétrique porte sur la distance de propagation. Dans ce cadre, les paramètres mécaniques sont fixés à $R = 10cm$ et $E = 1cm$ et le tirage est de nouveau aléatoire pondéré. L'objectif est de calculer une fissure médiane pour différentes distances de propagation. Pour chaque fissure médiane obtenue, la distance de Fréchet est calculée par rapport à la fissure XPER afin de déterminer la distance de propagation optimale.

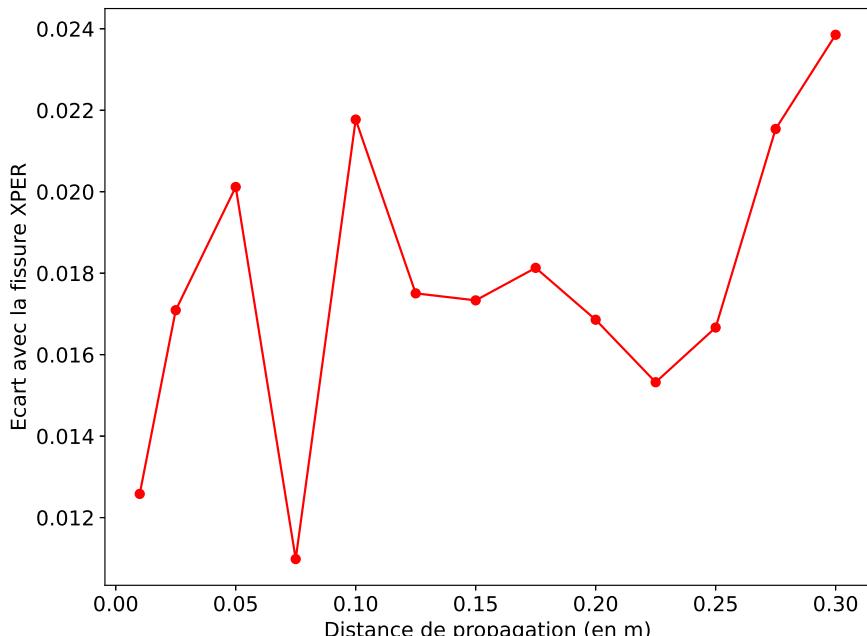


FIGURE 4.15 – Mesure de la distance de Fréchet entre la fissure prédictive et la fissure XPER en fonction de la distance de propagation

Sur la Figure 4.15, on remarque que les deux écarts les plus faibles sont obtenus pour une distance de propagation égale à $0.01m$ et à $0.075m$. Le meilleur résultat correspond à $0.075m$, c'est à dire que sur un parcours d'environ $1m$ le modèle probabiliste appelle le code mécanique environ 13 fois pour fournir un nouvel angle de propagation (soit tous les 7.5% du parcours). Les écarts les plus importants sont donnés par les distances de propagation les plus élevées, on peut supposer que le modèle fonctionne moins bien avec uniquement trois ou quatre appels au code mécanique, ce qui ne permet pas une réorientation de fissure macroscopique suffisante. A contrario, quand la distance d est trop faible, le prédicteur peut être mis en défaut car il a été calibré sur des microstructures comportant une vingtaine de granulats. On peut également noter que cette distance D représente un parcours d'environ 4 granulats traduisant une certaine robustesse.

Au final, le meilleur triplet de paramètres est donc :

$$R = 10cm, E = 1cm \text{ et } D = 7.5cm$$

4.3 Prédiction et analyse des résultats

Dans cette section, l'objectif est d'analyser les résultats obtenus par le couplage du modèle probabiliste et du code mécanique avec le triplet de paramètres issues de l'étude paramétrique. Pour rappel, les paramètres du modèle probabiliste sont toujours ceux de la Table 3.1.

La validation repose sur les outils présentés au chapitre 3 : l'enveloppe convexe et la fissure médiane. La fissure médiane est construite à partir de 100 réalisations et est considérée comme la prédition optimale. L'enveloppe convexe de prédition (ou région de confiance) est également mise en place à partir de l'ensemble des 100 réalisations et permet de délimiter une zone de fissuration, c'est à dire une région dans la microstructure où la fissure a la plus grande probabilité de se propager.

Remarque 4.3.1. *Dans le chapitre 3, la construction de l'enveloppe convexe repose sur une paramétrisation des fissures supposées se propager du bord gauche au bord droit de la microstructure. La fissure dans cette application se déplace du bas vers le haut ce qui requiert d'inverser les axes du repère dans les expressions fournies au chapitre 3.*

La Figure 4.16 et la Figure 4.17 montrent les faciès de rupture respectivement dans la structure et dans une zone d'intérêt obtenus à l'aide du couplage. La fissure médiane est représentée en vert et la simulation numérique XPER en violet. La prédition suit bien la fissure simulée par XPER. En particulier, la prédition prend correctement en compte l'influence de la sollicitation. De plus, l'enveloppe convexe contient la fissure issue de XPER.

La Table 4.6 résume les résultats issus de la prédition.

Comme dans l'étude numérique effectuée au chapitre 3, on retrouve une faible valeur de l'écart entre la fissure médiane et la fissure Xper ainsi qu'un diamètre de la région de confiance supérieur à cet écart. Concernant la tortuosité, l'erreur relative est de 0.7% et la tortuosité Xper est toujours contenue dans l'intervalle de confiance.

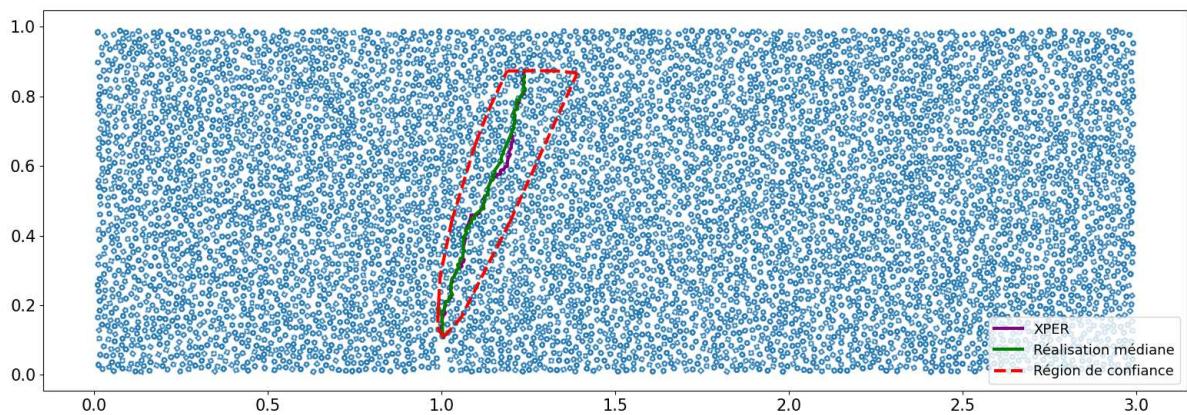


FIGURE 4.16 – Poutre en flexion trois points : prédiction (courbe verte) et simulation XPER (courbe violette) et en rouge la région de confiance

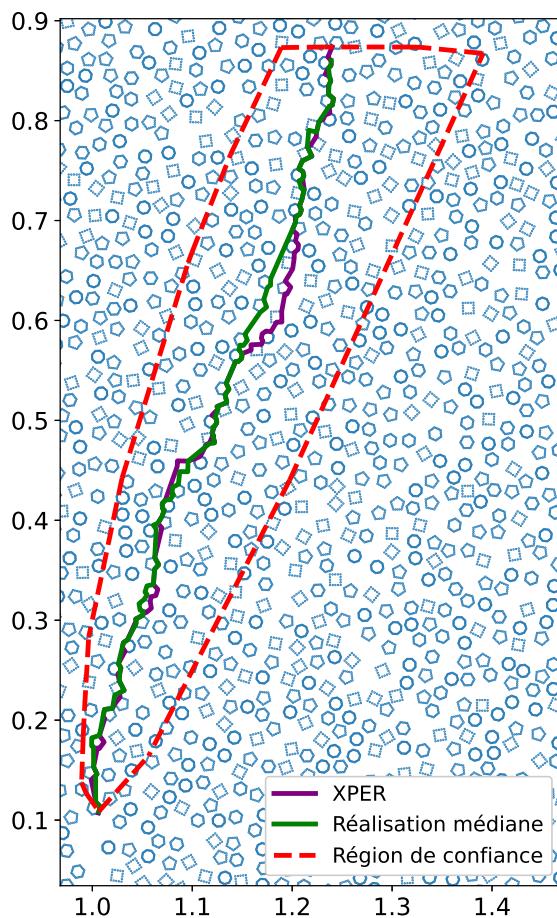


FIGURE 4.17 – Agrandissement de la Figure 4.16

Distance de Fréchet (fissure médiane et la fissure XPER)	0.010
Diamètre de la région de confiance	0.046
Tortuosité XPER	1.268
Tortuosité médiane	1.258
Borne supérieure de l'intervalle de confiance	1.324
Borne inférieure de l'intervalle de confiance	1.193

TABLE 4.6 – Analyse de la prédition

Une prédition de fissure (une réalisation) : Tr_1	0.16
fissure médiane ($Tr_1 \times 100$)	16
Modélisation probabiliste	8×10^{-4}
Calcul mécanique	4×10^{-3}

TABLE 4.7 – Temps de calcul (h) pour les prédictions du couplage sur un seul processeur

La Table 4.7 résume les temps de calcul de la prédition à l'aide du couplage. Pour obtenir la prédition optimale (fissure médiane), le temps de calcul s'élève à 16h. Ce temps est la somme des exécutions du modèle probabiliste et du code mécanique. Le coût du code probabiliste est principalement dû à l'algorithme de détection (voir procédure 2.2.1). Son rôle est la détection des candidats dans la microstructure, c'est à dire les points qui respectent les hypothèses (H2) et (H4) (voir section 1.1.3). Le temps de calcul d'une détection est d'environ 3 secondes pour 120 000 points. Le temps d'une simulation mécanique est principalement dû au calcul des contraintes par Cast3M, il est d'environ 10 secondes.

Le gain en temps de calcul par rapport à une simulation avec XPER est conséquent avec une réduction d'un facteur 12500 (comparaison sur le même nombre de processeurs).

4.4 Conclusion et discussion

Le couplage du code mécanique et du modèle probabiliste a montré son efficacité sur un cas complexe de fissuration en estimant une zone probable de fissuration ainsi que la fissure médiane dans un temps de calcul très réduit par rapport à une simulation de la rupture avec XPER. Cependant, afin d'évaluer la robustesse du couplage, plusieurs microstructures devront être simulées. De plus, il sera pertinent d'étudier si les valeurs des paramètres d'épaisseur de fissure, de rayon du voisinage des contraintes et la distance

de propagation sont valables pour d'autres tailles de microstructures de béton numérique, et d'autres chargements.

Le calcul mécanique, effectué sur un milieu homogène, ne prend pas en compte les hétérogénéités (granulats) dans le calcul du champs de contraintes et de l'angle de propagation.

Notons que le modèle probabiliste ne permet pas une prédition pertinente proche des bords. De plus, le couplage ne permet pas d'accéder aux états de fissuration. Le but de ce couplage est d'une part de discriminer les calculs pertinents et d'autre part de sélectionner des zones de fissuration probables permettant un raffinement adaptatif et une réduction du coût de calcul du logiciel XPER.

Conclusions et Perspectives

Ces travaux de thèse se sont inscrits dans le cadre de l'extension de la durée d'exploitation des centrales nucléaires en s'intéressant plus particulièrement au phénomène de fissuration des matériaux cimentaires. L'objectif a été de développer une stratégie de réduction du coût de calcul des études de fissuration réalisées à l'aide de codes mécaniques à champ complet à l'échelle mésoscopique. Pour cela, un modèle mathématique rapide à évaluer a été proposé pour prédire la trajectoire d'une fissure au sein d'une microstructure de béton. Sa construction a été réalisée en deux étapes. La première étape a consisté, à partir de considérations mécaniques, à introduire deux indicateurs géométriques apportant des informations sur le comportement local d'une fissure. Il s'agit de l'angle à réaliser par rapport à une direction de propagation locale et de la distance à parcourir pour atteindre un nouveau point de la fissure (ou point candidat) depuis la pointe de la fissure. Un algorithme de détection a été développé et permet d'évaluer automatiquement ces indicateurs pour tous les points candidats connaissant la pointe de fissure et la direction de propagation locale. Une étude numérique détaillée de ces indicateurs a été réalisée à partir d'une base d'apprentissage de microstructures déjà fissurées par le code de calcul XPER. Elle a montré qu'ils permettent de discriminer le comportement local de la fissure en prenant en compte deux phénomènes caractéristiques de la fissuration, la propagation préférentielle sur la frontière des granulats et la propagation locale en mode I.

Dans un second temps, ces indicateurs ont servi de base au développement d'un modèle de chaîne de Markov homogène permettant de prédire de proche en proche le chemin de fissuration. Ce modèle est par construction probabiliste et, connaissant la direction locale de propagation, permet de fournir plusieurs réalisations de trajectoires qui peuvent être exploitées pour quantifier une incertitude de prédiction.

Par la suite, le nouveau modèle de prédiction a ensuite été vérifié sur un ensemble d'apprentissage de microstructures à granulats carrés et validé sur un ensemble test de microstructures à granulats multiformes. Ses paramètres ont été estimés puis une étude de la stabilité de cette estimation en fonction du nombre de microstructures dans l'ensemble a été menée. Plusieurs tests numériques ont été effectués en considérant différents types de quantités d'intérêts :

- la fissure médiane afin d'approcher la fissure simulée par XPER,
- une région de confiance représentée par une enveloppe convexe estimant la zone où la fissure peut se propager,
- une tortuosité médiane et un intervalle d'incertitude de prédiction donnant accès à des grandeurs mécaniques globales.

Les résultats ont montré une cohérence entre les informations fournies par le modèle et les fissures simulées par le code XPER. En effet, les réalisations médianes obtenues sont généralement proches des simulations XPER. De plus, pour l'ensemble des microstructures étudiées, la fissure XPER et sa tortuosité sont toujours contenues respectivement dans la région de confiance et l'intervalle de tortuosité.

Une analyse complémentaire a enfin été fournie pour évaluer l'influence de la forme des granulats de l'ensemble d'apprentissage sur les performances du modèle. Il est apparu que c'est la base avec granulat carré qui conduit aux meilleures performances.

La dernière contribution décrite dans ce manuscrit concerne l'application du nouveau modèle sur un cas standard de la mécanique de la rupture, un essai sur une poutre en flexion trois points. La simulation numérique de cet essai est particulièrement coûteuse en temps de calcul. La spécificité de cette application a été la détermination de la direction locale de propagation de la fissure non connue a priori. Il a ainsi été proposé d'estimer cette quantité par un code mécanique Éléments Finis. L'analyse des résultats a montré que le modèle de prédiction est capable d'estimer une fissure médiane proche de la fissure simulée avec une incertitude raisonnable tout en conduisant à une réduction drastique du temps de calcul.

Plusieurs perspectives sont envisagées pour poursuivre ces travaux.

Il sera nécessaire de valider dans un premier temps la robustesse des paramètres estimés par l'étude paramétrique du dernier chapitre pour d'autres tailles de microstructure mais également d'autres types de chargement. Dans un second temps, une réflexion pourra être menée sur l'amélioration

du coût de l'algorithme de détection utilisé par la prédiction probabiliste, qui à l'heure actuelle est complètement vectorisé mais présente encore un temps de calcul de quelques secondes lorsque le nombre de points est de l'ordre de 120 000.

Plusieurs travaux sont également à considérer pour étendre la construction de notre outil à des situations plus représentatives de celles rencontrées sur un béton de centrale. Cela inclut notamment de tester la robustesse du modèle de prédiction à des formes non convexes de granulats comme on pourrait en trouver dans la microstructure d'un béton réel. On pourra s'intéresser aussi au cas de microstructures tri-dimensionnelles qui demandera une adaptation du modèle et de ses indicateurs ainsi que de l'algorithme de détection.

D'un point de vue méthodologique, ce travail devra être complété par le développement d'un algorithme de planification d'expériences afin de réaliser de la sélection de microstructures sur un critère mécanique d'intérêt. Il existe déjà plusieurs contributions dans la littérature traitant de la planification d'expériences numériques sur la base d'un métamodèle. Il s'agira donc ici d'exploiter ces idées afin de proposer un critère de planification exploitant par exemple l'histogramme des tortuosités et permettant d'explorer toutes les zones d'intérêt de l'ensemble des microstructures.

Bibliographie

- [1] R. Affes. *Relations microstructure-fissuration-perméabilité dans les milieux granulaires cimentés(Ch.3)*. PhD thesis, Université de Montpellier, 2012.
- [2] A. Socie. *Modélisation chimio-mécanique de la fissuration de matériaux cimentaires : vieillissement et tenue des enceintes de confinement des centrales nucléaires*. PhD thesis, Université de Montpellier, 2019.
- [3] C. Pelissou, Y. Monerie, and F Perales. Génération de microstructures polydispersées : application à l'étude de fissuration d'un béton numérique par les zones cohésives. *2èmes Journées Matériaux*, 2015.
- [4] S. Cuvilliez. *Passage d'un modèle d'endommagement continu régularisé à un modèle de fissuration cohésive dans le cadre de la rupture quasi-fragile*. PhD thesis, École nationale supérieure des mines de Paris, 2012.
- [5] W. Le Goff, L. Cuisset, and L. Depieds. Rapport de stage : Prédiction de propagation de fissure par la méthode éléments finis. *Polytech Montpellier*, 2020.
- [6] C. Geuzaine and J.F. Remacle. Gmsh : A 3-d finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, pages 1309 – 1331, 2009.
- [7] M. Drissi, B. Mezghiche, and M.L.K. Khouadjia. Influence des paramètres de composition du béton sur sa résistance de compression. *Courrier du Savoir – N°20*, pages 73–78, 2015.
- [8] K. Kovler and V. Chernov. Types of damage in concrete structures. *Woodhead Publishing Series in Civil and Structural Engineering*, pages 32 – 56, 2009.

- [9] J. Escoda. *Modélisation morphologique et micromécanique 3D de matériaux cimentaires*. PhD thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2012.
- [10] D. Jeulin. *Caractérisation morphologique et modèles de structures aléatoires*. Hermès Science, 2015.
- [11] P.K. Mehta and P.J. Monteiro. Représentativité d'un béton numérique : stratégie d'élaboration d'un protocole de génération de micro-structure équivalente. *8th international congress on the chemistry of cement, Rio de janeiro*, page 433–437, 1990.
- [12] L. Bichet. *Mécanismes de transports dans la fissuration des matériaux hétérogènes : application à la durée de vie d'exploitation des centrales nucléaires*. PhD thesis, Université de Montpellier, 2017.
- [13] F. Peralès. *Fissuration des matériaux à gradient de propriétés : application au zircaloy hydrure*. PhD thesis, Université de Montpellier, 2005.
- [14] Y. Monerie and V. Acary. Formulation dynamique d'un modèle de zone cohésive tridimensionnel couplant endommagement et frottement. *Revue Européenne des Éléments Finis, Hermès*, pages 489–503, 2001.
- [15] M. Jean. The non-smooth contact dynamics method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Elsevier*, 177 :235–257, 1999.
- [16] F. Perales, F. Dubois, Y. Monerie, B. Piar, and L. Stainier. A nonsmooth contact dynamics-based multi- domain solver. code coupling (xper) and application to fracture. *European Journal of Computational Mechanics*, 19 :389–417, 2010.
- [17] F. Perales, S. Bourgeois, A. Chrysochoos, and Y. Monerie. Two field multibody method for periodic homogenization in fracture mechanics of nonlinear heterogeneous materials. *Engineering Fracture Mechanics*, 75 :3378 – 3398, 2008.
- [18] T. Hasti, R. Tibshirani, and J. Friedman. *The Elements of Statistical Learning Data Mining, Inference, and Prediction*. Springer Series in Statistics, 2013.
- [19] A. Kumar Das, D. Suthar, and C.K.Y. Leung. Machine learning based crack mode classification from unlabeled acoustic emission waveform features. *Cement and Concrete Research*, 121 :42 – 57, 2019.

- [20] O. Çağlar and S. Arzu. Performance comparison of pretrained convolutional neural networks on crack detection in buildings. In *Proceedings of the 35th International Symposium on Automation and Robotics in Construction (ISARC)*. International Association for Automation and Robotics in Construction (IAARC), 2018.
- [21] H. Kim, E. Ahn, M. Shin, and S.H. Sim. Crack and noncrack classification from concrete surface images using machine learning. *Structural Health Monitoring*, 18 :725–738, 2019.
- [22] S. Pijush. Prediction of fracture parameters of concrete by relevance vector machine. *International Journal of Engineering Research in Africa*, 17 :1–7, 07 2015.
- [23] Z.M. Yaseen, R.C. Deo, A. Hilal, A.M. Abd, S. Bueno, L.C an Salcedo-Sanz, and M.L. Nehdi. Predicting compressive strength of lightweight foamed concrete using extreme learning machine model. *Advances in Engineering Software*, 115 :112 – 125, 2018.
- [24] F. Willot. The power laws of geodesics in some random sets with dilute concentration of inclusions. *Notes in Computer Science*, Springer, pages 535–546, 2015.
- [25] E. Le Mire, E. Burger, B. Iooss, and C. Mai. Prediction of crack propagation kinetics through multipoint stochastic simulations of microscopic fields. *The European Journal of Physics- Nuclear Sciences and Technology*, 2021.
- [26] G. Bayar and T. Bilir. A novel study for the estimation of crack propagation in concrete using machine learning algorithms. *Construction and Building Materials*, 215 :670 – 685, 2019.
- [27] A.M. Neville. *Propriétés des bétons*. Centre de recherche inter-universitaire sur le béton, 2000.
- [28] M. Briffaut. *Étude de la fissuration au jeune âge des structures massives en béton : influence de la vitesse de refroidissement, des reprises de bétonnage et des armatures*. PhD thesis, École normale supérieure de Cachan, 2010.
- [29] S. Poyet. *Étude de la dégradation des ouvrages en béton atteints par la réaction alcali-silice : Approche expérimentale et modélisation numérique multi-échelles des dégradations dans un environnement hydrochimo-mécanique variable*. PhD thesis, Université de Marne-La-Vallée, 2003.

- [30] P. Acker and F.J. Ulm. Creep and shrinkage of concrete : Physical origins and practical measurements. *Nuclear Engineering and Design*, 203 :143–158, 2001.
- [31] T. Kretz and al. Recommandations pour la prévention des désordres dus à la réaction sulfatique interne. *Rapport Technique, Laboratoire des Ponts et Chaussées*, pages 9–11, 2007.
- [32] A.D. Maio, G. Giaccio, and R. Zerbino. Failure mechanism of concrete, combined effects of coarse aggregates and specimen geometry. *Construction and Building Materials*, 10(8) :571 – 575, 1996.
- [33] E. Erdogan. Fracture mechanics. *International Journal of Solids and Structures*, 37(1) :171 – 183, 2000.
- [34] M. Safiuddin, A.B.M. Kaish, W. Chin Ong, and S.N Raman. Early-age cracking in concrete : Causes, consequences, remedial measures, and recommendations. *Applied Sciences, MDPI*, 8, 2018.
- [35] A. Gangnant. Modélisation de la rupture quasi-fragile d'un béton à l'échelle mésoscopique. *34èmes Rencontres Universitaires de Génie Civil de l'AUGC Belgique*, pages 3–5, 2016.
- [36] H. Hafid. *Influence des paramètres morphologiques des granulats sur le comportement rhéologique des bétons frais : étude sur systèmes modèles(Ch.1-2)*. PhD thesis, Université Paris-Est, 2012.
- [37] J. Noureddine. *Influence de la forme et de la rugosité des particules d'un granulat sur les propriétés et les coûts du béton compacté au rouleau (Ch.2)*. PhD thesis, Faculté des sciences appliquées du Canada, 1996.
- [38] M. Elices and C.G. Rocco. Effect of aggregate size on the fracture and mechanical properties of a simple concrete. *Engineering Fracture Mechanics*, 75(13) :3839 – 3851, 2008.
- [39] A.W. Pope and J.M. Jennings. The influence of mixing on the micro-structure of the cement paste/aggregate interfacial zone and on the strength of mortar. *Journal of materials science*, 27 :6452–6462, 1992.
- [40] X. Chen, J. Yan, and H. Yang. Influence of aggregates on cracking sensitivity of concrete. *Applied Mechanics and Materials*, 204-208 :3299–3302, 2012.
- [41] K.M. Alexander and J.H. Taplin. Analysis of the strength and fracture of concrete based on an unusual insensitivity of cement-aggregate

- bond to curing temperature. *Australian Journal of Applied Science*, 15 :160–170, 1964.
- [42] T. Akçaoglu, M. Tokyay, and T. Çelik. Effect of coarse aggregate size and matrix quality on itz and failure behavior of concrete under uniaxial compression. *Cement and concrete composites*, 26 :633–638, 2004.
 - [43] J.J. Zheng. Thickness of interfacial transition zone and cement content profiles around aggregate. *Magazine of concrete Research*, 7 :397–406, 2005.
 - [44] M. Husem. The effect of bond strengths between lightweight and ordinary aggregate-mortar, aggregate-cement paste on the mechanical properties of concrete. *Elsevier, Materials Science and engineering*, 363 :152–158, 2003.
 - [45] S. Walker and D.L. Bloem. Effect of aggregate size on properties of concrete. *Journal of ACI*, 4 :448–453, 1960.
 - [46] F. Larrard and A. Belloc. L'influence du granulat sur la résistance à la compression des bétons. *Bulletin Laboratoire central des Ponts et Chaussées*, pages 43–44, 1999.
 - [47] M.A. Ward and D.J. Cook. The mechanism of tensile creep in concrete. *Magazine of Concrete Research*, pages 151–158, 1969.
 - [48] G.I Barenblatt. The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fractures. *Advances In Applied Mechanics*, 7 :55–129, 1962.
 - [49] D.S Dugdale. Yielding of steel sheets containing slits. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 8 :100–104, 1960.
 - [50] A.A. Griffith. The phenomena of rupture and flow in solide. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 1921.
 - [51] Y. Monerie. *Fissuration des matériaux composites : rôle de l'interface fibre-matrice*. PhD thesis, Université de Aix-Marseille, 2000.
 - [52] M. Jean. The non-smooth contact dynamics method. *Computer Method in Applied Mechanics and Engineering*, 177 :235–277, 1999.
 - [53] M. Raous, L. Cangémi, and M. Cocu. A consistent model coupling adhesion, friction and unilateral contact. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 177 :383–399, 1999.

- [54] J.C. Michel, P. Suquet, and F. Thébaud. Une modélisation du rôle des interfaces dans le comportement des composites à matrice métallique. *Revue Européenne des Éléments*, 3 :573–595, 1994.
- [55] F. Perales, Y. Monerie, F. Dubois, R. Mozul, and F. Babik. Xper : une plateforme pour la simulation numérique distribuée d’interactions multiphysique entre corps. Proceeding du 13e colloque national en calcul des structures, Giens, 2017.
- [56] N. Blal, L. Daridon, Y. Monerie, and S. Pagano. Artificial compliance inherent to the intrinsic cohesive zone models : criteria and application to planar meshes. *International journal of Fracture*, 178 :71–83, 2012.
- [57] R. Pyrz. Quantitative description of the microstructure of composite materials. part 1 : Morphology of unidirectional composite systems. *Composites Science and Technology*, 50 :197–208, 1994.
- [58] R. Pyrz. Correlation of microstructure variability and local stress field in two-phase materials. *Materials Science and Engineering*, 177 :253–259, 1994.
- [59] B. Sericola. *Chaînes de Markov - Théorie, algorithmes et applications*. Lavoisier, 2013.
- [60] M. Barra, A.F. Dahl, K.G. Vetvik, and A.E. MacGregor. A markov chain method for counting and modelling migraine attacks. *Scientific Reports*, 2020.
- [61] S. Twisa, S. Kazumba, M. Kuriann, and M.F. Buchroithner. Evaluating and predicting the effects of land use changes on hydrology in wami river basin, tanzania. *MDPI*, 2020.
- [62] S. Stigler. The epic story of maximum likelihood. *Statistical Science*, 22 :598–620, 2007.
- [63] J.A. Nelder and R. Mead. Mixed variable optimization of a load-bearing thermal insulationsystem using a filter pattern search algorithm. *The Computer Journal*, 7 :308–313, 1965.
- [64] D.R. Jones. A taxonomy of global optimization methods based on response surfaces. *Journal of Global Optimization*, 21 :345 – 383, 2001.
- [65] M. Powell. On trust region methods for unconstrained minimization without derivatives. *Mathematical Programming*, 97 :605–623, 2003.

- [66] A.R. Conn, K. Scheinberg, and L.N. Vicente. Introduction to derivative-free optimization. *Society for Industrial and Applied Mathematics.*, 2009.
- [67] X. Yunhai, W. Zengxin, and W. Zhiguo. A limited memory bfgs-type method for large-scale unconstrained optimization. *Computers and Mathematics with Applications*, 56 :1001 – 1009, 2008.
- [68] M. Jebli. Investigations multi-échelles du vieillissement du béton atteint de la réaction sulfatique interne. *Rapport PSN-RES/SEMI*, 2018.
- [69] J.D. Boissonnat. *Géométrie algorithmique : des données géométriques à la géométrie des données*. Collège de France / Fayard, 2017.
- [70] A. Driemel, S. Har-Peled, and C. Wenk. Approximating the fréchet distance for realistic curves in near linear time. *Discrete and Computational Geometry*, 48 :94–127, 2012.
- [71] C.F. Jekel, G. Venter, M.P. Venter, N. Stander, and R.T. Haftka. Similarity measures for identifying material parameters from hysteresis loops using inverse analysis. *International Journal of Material Forming*, 12 :355–378, 2019.
- [72] T. Charras and J. Kichenin. *Développer dans Cast3m*. CEA, 2011.
- [73] I. Holland. Fundamentals of the finite element method. *Computers and Structures*, 4 :3 – 15, 1974.
- [74] J. Lemaître, J.L Chaboche, A. Benallal, and R. Desmorat. *Mécanique des matériaux solides*. Dunod, 2009.