MODÈLES MORPHOLOGIQUES DE MICROSTRUCTURES ALEATOIRES

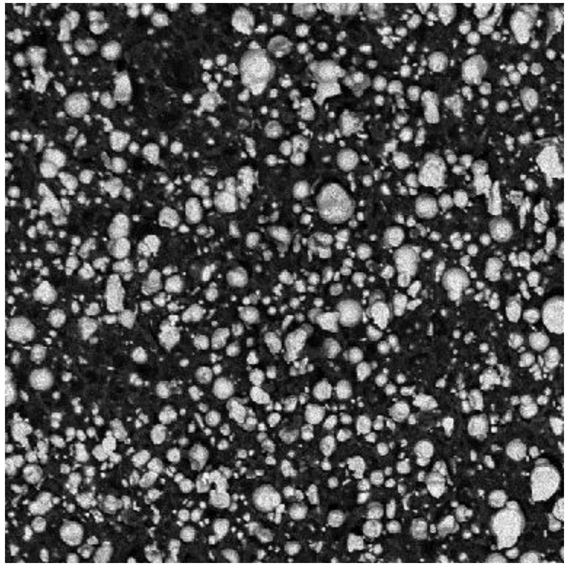
MAXIME MOREAUD, maxime.moreaud@ifpen.fr

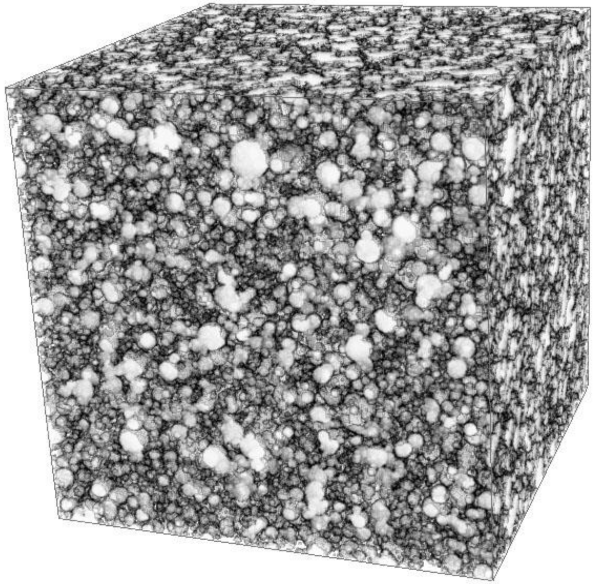
LYON CPE ÉCOLE SUPÉRIEURE DE CHIMIE PHYSIQUE ÉLECTRONIQUE DE LYON

ifp Energies nouvelles

Ce que l'on va aborder dans ce cours

Modéliser une structure 3D à partir d'images 2D...

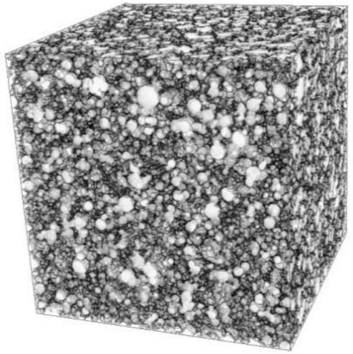
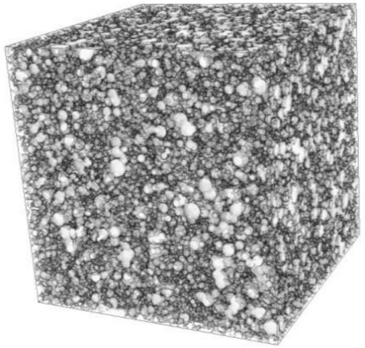
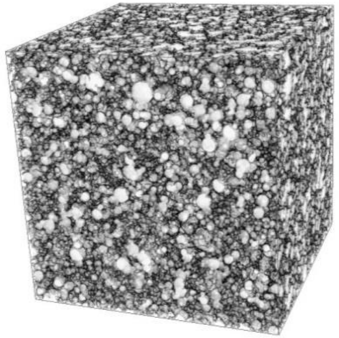




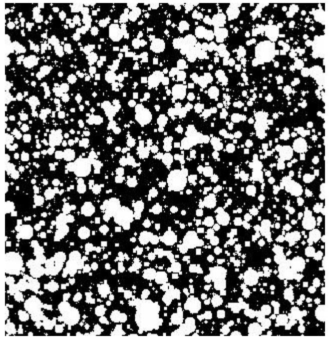
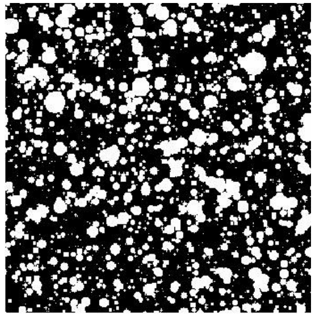
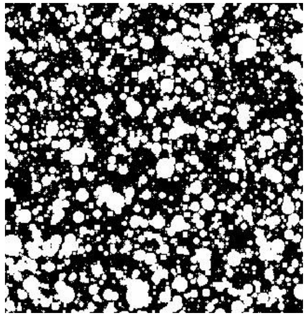
... en gardant les propriétés statistiques observées en 2D

Ce que l'on va aborder dans ce cours

Créer des nouvelles structures 3D avec un paramètrage "réaliste"
(quantité de produits, temps de mélange ...)

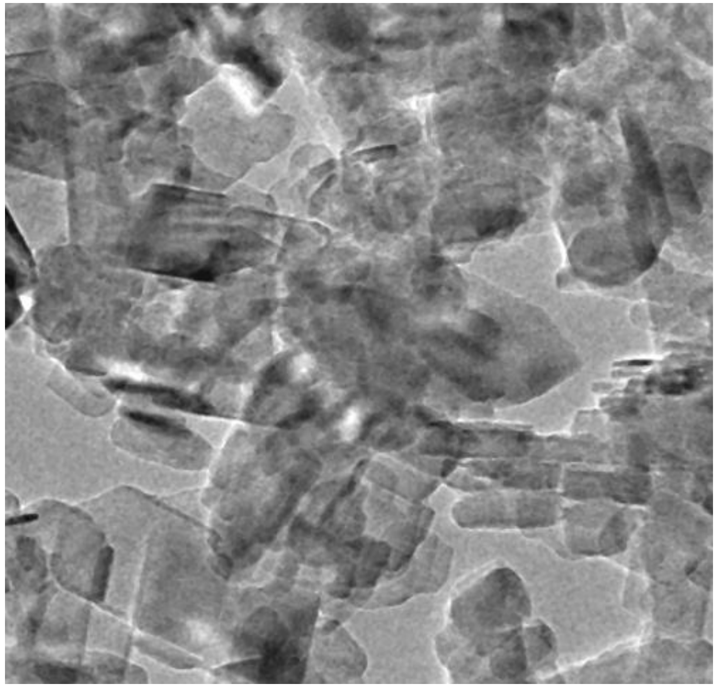
structure initiale | Vv=0.25 | Vv=0.34

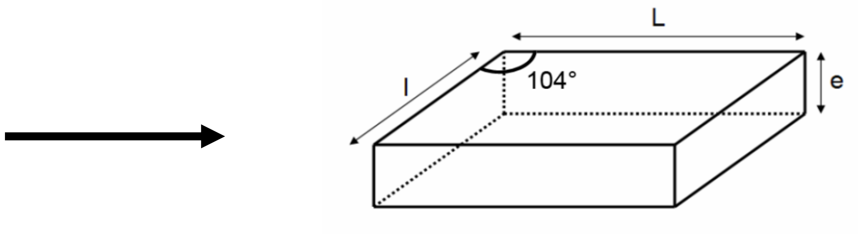
Intérêt : mesurer des propriétés physiques sur des matériaux virtuels

Ce que l'on va aborder dans ce cours

Estimer les paramètres morphologiques des grains d'une structure sans segmenter ces grains individuellement



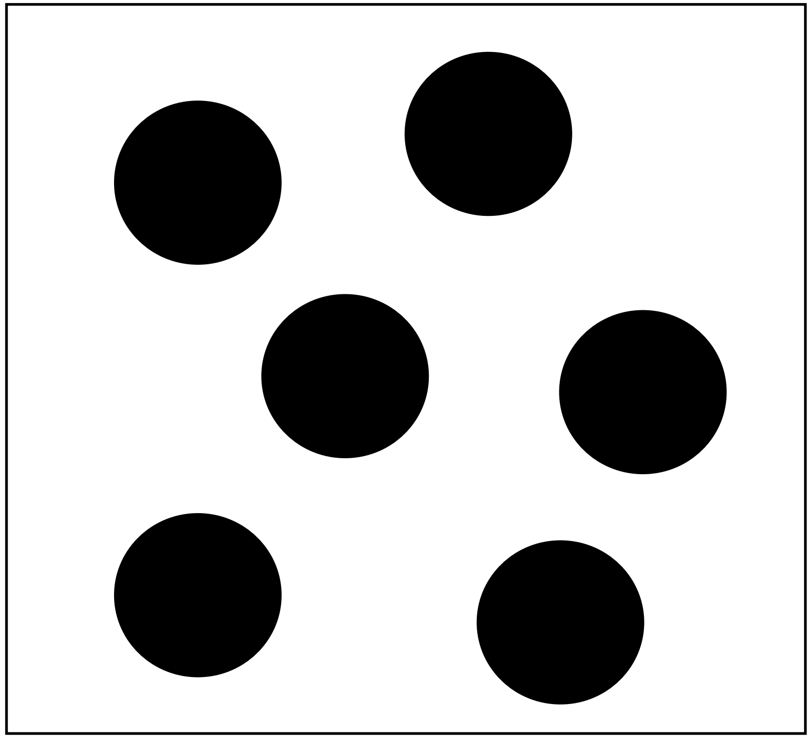
Grain moyen :

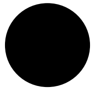


L = 35.5 nm
l = 36 nm
e = 5.5 nm

SCHEMA BOOLÉEN

Domaine D, n objets





A’ : grains primaires

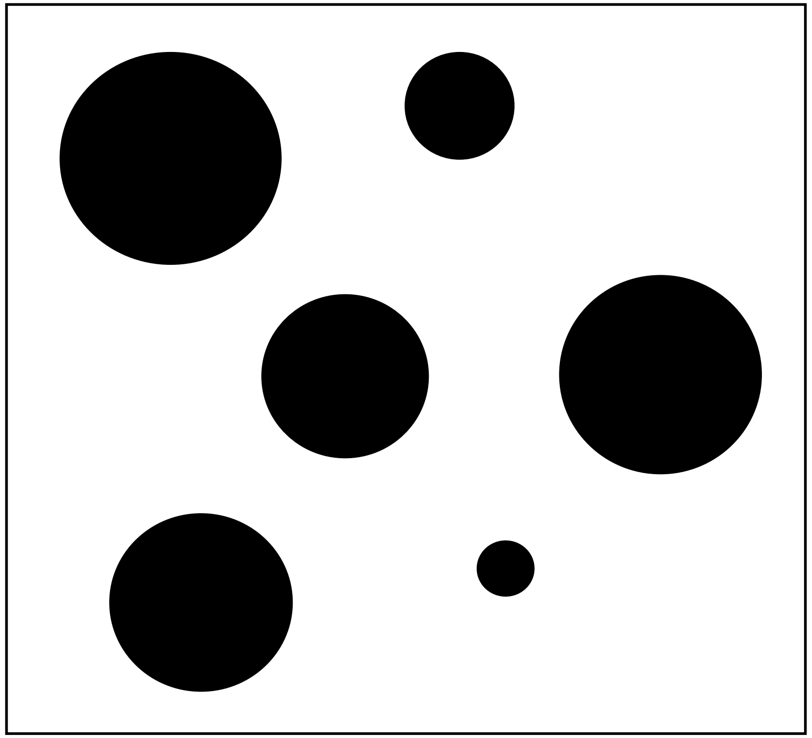
A=U(A’)

S(A’)= Aire de A’

Aa : fraction surfacique de A

Aa ?

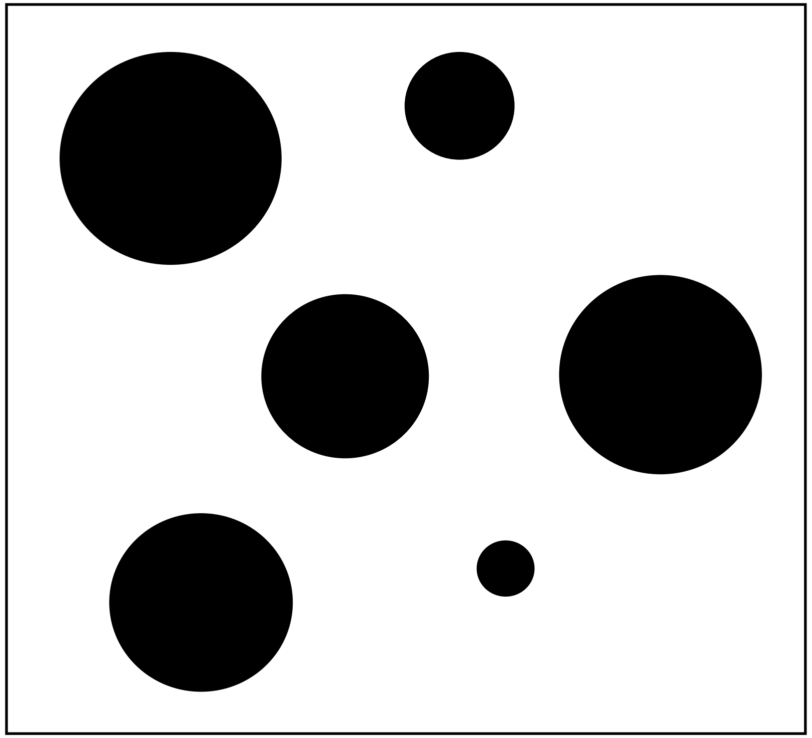
$$Aa = \frac{S(A)}{S(D)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} S(A_i')}{S(D)}$$



A' : grains primaires aléatoires

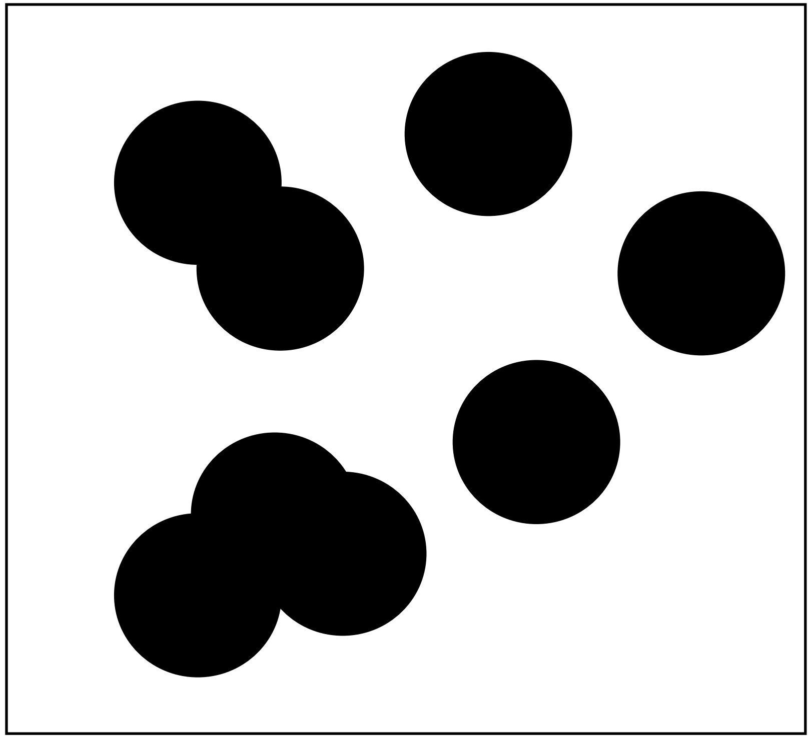
$$Aa = \frac{S(A)}{S(D)} = \frac{n.\overline{S}(A')}{S(D)}$$

Nombre aléatoire d’objets aléatoires



Ɵ: densité de points (nb. points par unité de surface)

$$Aa = \frac{\theta.\overline{S}(A')}{S(D)}$$



Nombre aléatoire d’objets aléatoires et recouvrement

Placement de points dans l’espace avec une certaine densité, points mutuellement indépendants (pas de contraintes)

Processus de points de Poisson

$$1 - Aa = \exp\left(-\theta.\bar{S}(A')\right)$$

Schéma booléen :

Union de grains primaires A' placés suivant un processus de points de Poisson de densité θ

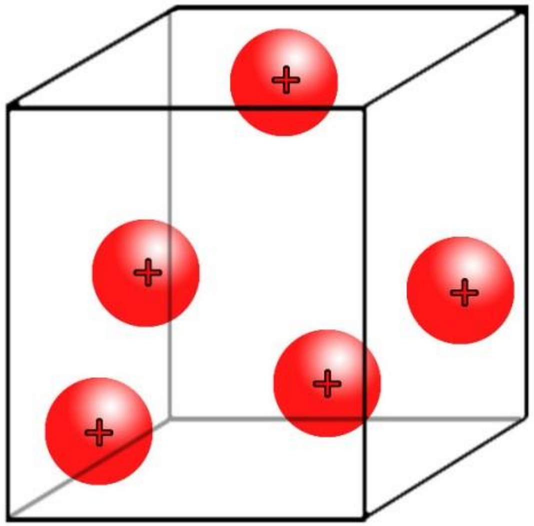
Paramètres : (θ, A')

En général, on souhaite simuler un schéma avec une fraction surfacique visée, on cherche donc à estimer Ө

$$\theta = \frac{-\ln(1 - Aa)}{\overline{S}(A')}$$

Propriété : stationnaire (une caractéristique du modèle ne dépend pas de l’endroit où on la calcule)

Domaine D (3D) , n objets



Vv ?

$$Vv = \frac{V(A)}{V(D)} = \frac{\sum_{i=1}^{n} V(A_i')}{V(D)}$$

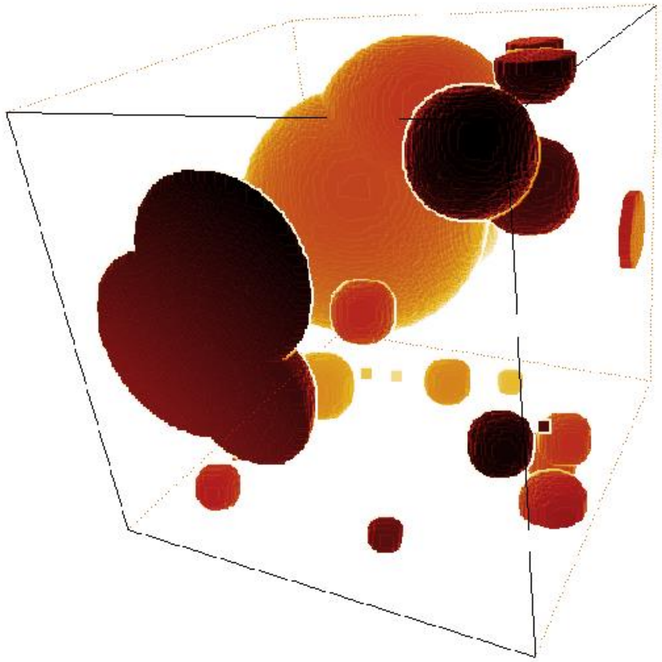
 A’ : grains primaires

A=U(A’)

V(A’)= Volume de A’

Vv : fraction volumique de A

Domaine D (3D) , nombre aléatoire d'objets



Nombre aléatoire d'objets aléatoires et recouvrement

Placement de points dans l'espace avec une certaine densité, points mutuellement indépendants (pas de contraintes)

Processus de Point de Poisson

$$1 - V_v = \exp\left(-\theta . \overline{V}(A')\right)$$

Schéma booléen :

Union de grains primaires A' placés suivant un processus de point de Poisson de densité θ

Paramètres : (θ, A')

En général, on souhaite simuler un schéma avec une fraction volumique visée, on cherche donc à estimer Ɵ

$$\theta = \frac{-\ln(1 - Vv)}{\overline{V}(A')}$$

Loi de Poisson

Loi de Poisson

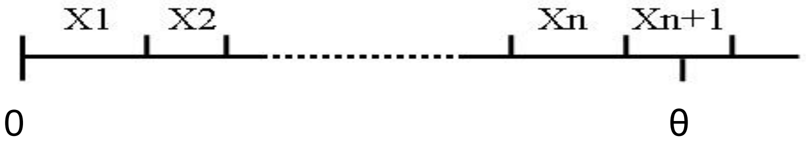
Nb. évènements pendant un intervalle, ces évènements se produisant avec une fréquence moyenne et indépendamment du temps écoulé depuis l’évènement précédent (pas de mémoire)

Fonction de répartition :

$$P\{N = n\} = e^{-\theta} \frac{\theta^n}{n!}$$

Génération en pratique : utilisation d'une propriété de la loi de Poisson

loi de Poisson de moyenne θ = nombre d'intervalles indépendants X1, ... Xn suivant une loi exponentielle de moyenne 1 contenus dans [0, θ]



Loi de Poisson

Algorithme d'un générateur de nombre suivant une loi de Poisson

Loi exponentielle :
densité de probabilité :

$$f(x) = \frac{1}{\mu}\exp\left(-\frac{x}{\mu}\right)$$

fonction de répartition :

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)\,dx = \begin{cases} 0 \text{ si } x < 0 \\ 1\text{-}\exp(\text{-}\mu x) \text{ sinon} \end{cases}$$

générateur de nombre suivant une loi exponentielle : méthode d'inversion de la fonction de répartition
Propriété : si y uniformément réparti dans [0;1], alors $x=F^{-1}(y)$ est distribuée selon la loi f(x)

→ si y uniforme dans [0;1], -ln(1-y) suit une loi exponentielle de moyenne 1

$$\text{si } \mu = 1,\ x = F^{-1}(y) = -\ln(1-y)$$

Loi de Poisson

Algorithme d'un générateur de nombre suivant une loi de Poisson

$$
\begin{aligned}
&-\ln(a)-\ln(a)-\ldots-\ln(a)<\theta \\
&\ln(a)+\ln(a)+\ldots+\ln(a)>-\theta \\
&\exp(\ln(a)+\ln(a)+\ldots+\ln(a))>\exp(-\theta) \\
&a\,.\,a\ldots a>\exp(-\theta)
\end{aligned}
$$

```
initialisation: n=0 et a=1

Tant que (a> exp(-θ ))
{
   a=a.U[0;1]
   n=n+1
}

retourner n
```

U[0;1] : générateur loi uniforme dans [0;1]