

Schéma booléen

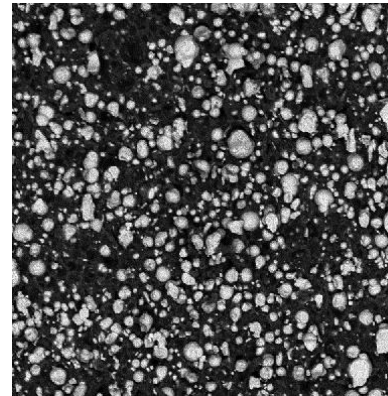
Exemple d'application* (1)

Problématique: amélioration des propriétés d'un matériau composite

Propriétés mécanique, thermique, diélectrique... effectives d'un matériau, sont fonction des propriétés de ses constituants et de sa structure

Améliorations possibles:

- changer les constituants
- changer la structure



Méthode couteuse en argent et en temps:
Fabrication d'un gamme complète de matériaux et mesure des propriétés

*M. Moreaud, Propriétés morphologiques multi-échelles et prévision du comportement diélectrique de nanocomposites, Thèse Ecole des Mines de Paris, 2006.



Schéma booléen

Exemple d'application (1)

Problématique: amélioration des propriétés d'un matériau composite

Méthode rapide et moins couteuse:
Fabrication d'une gamme complète de matériaux virtuels à l'aide de simulations numériques

Pour faire cela, il faut:

- modéliser la structure du matériau
- pouvoir faire varier cette structure de manière réaliste (en lien avec les procédés de fabrication)
- connaissant la structure et les propriétés des constituants, estimer la propriété effective recherchée (utilisation de méthodes d' « homogénéisation »)

Schéma booléen

Exemple d'application (1)

Problématique: amélioration des propriétés d'un matériau composite

Méthode rapide et moins couteuse:
Fabrication d'une gamme complète de matériaux virtuels à l'aide de simulations numériques

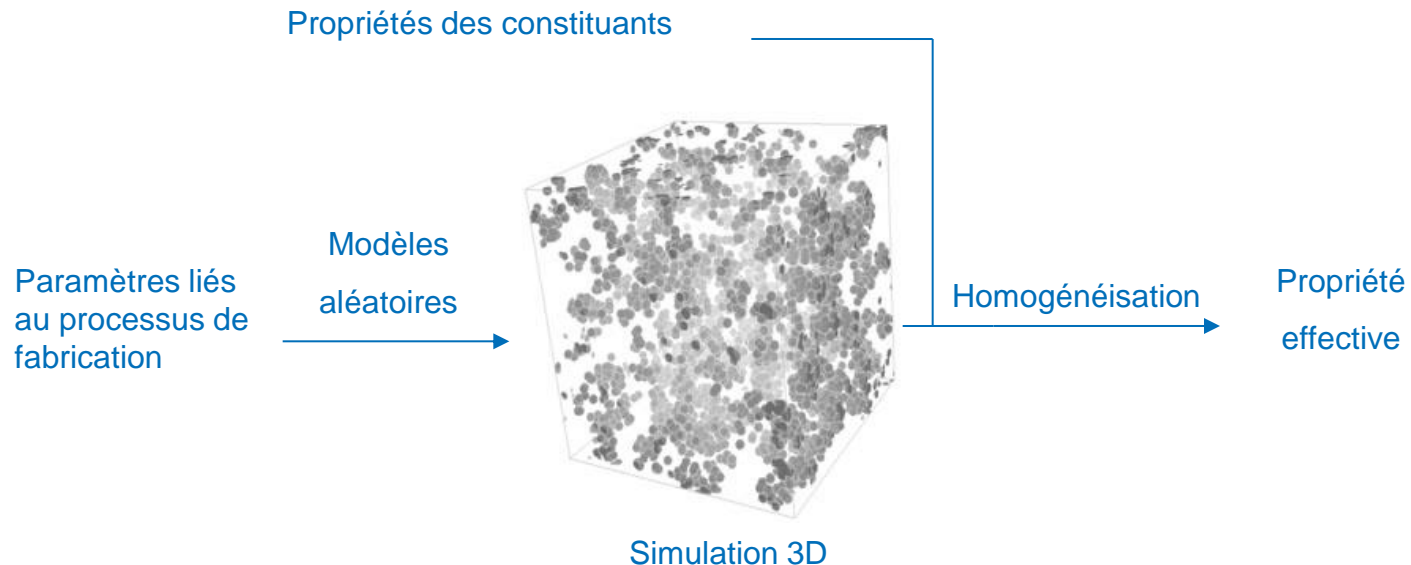


Schéma booléen

Exemple d'application (1)

Matériaux composites matrice élastomère, poudre de fer carbonyl

But : caractériser la permittivité diélectrique effective (besoin de la structure 3D du matériau) et créer virtuellement de nouvelles structures

Problème: seulement accès à une information 2D (microscopie optique)

0.25µm/pixel

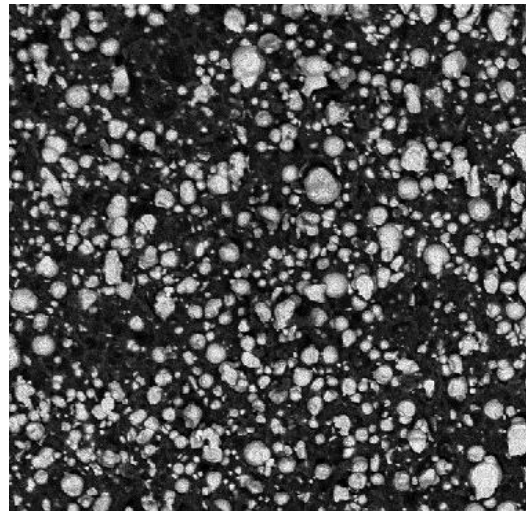
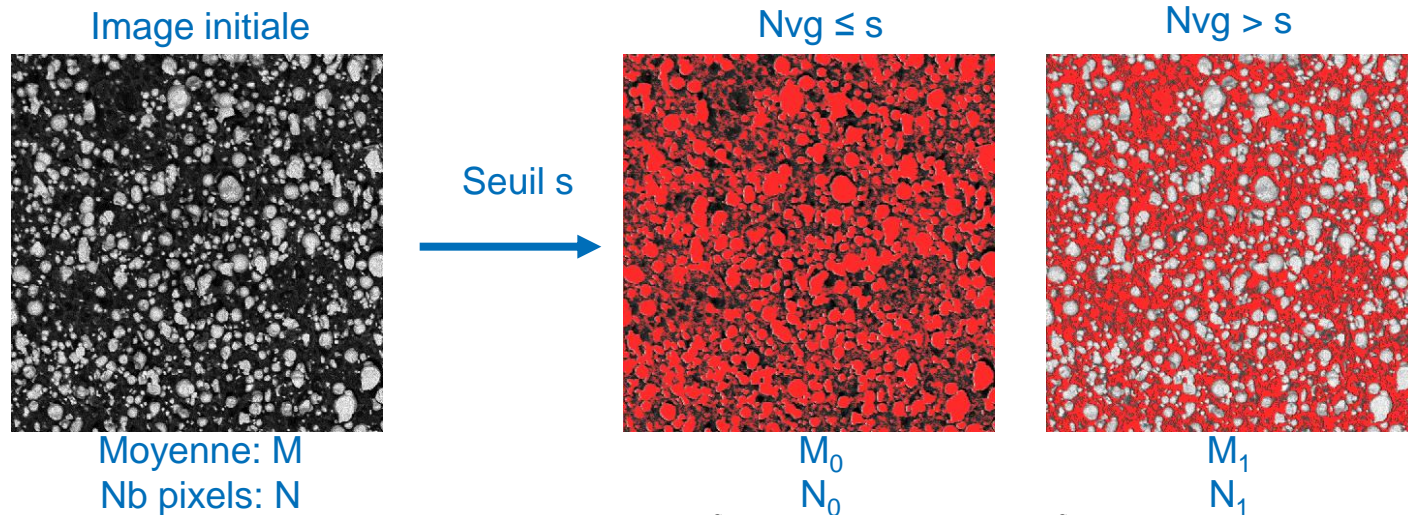


Schéma booléen

Exemple d'application (1)

Segmentation binaire de l'image (matrice – grains)

Seuillage par maximisation de la variance interclasse



$$V(s) = (M_0^s - M)^2 \frac{N_0^s}{N} + (M_1^s - M)^2 \frac{N_1^s}{N}$$

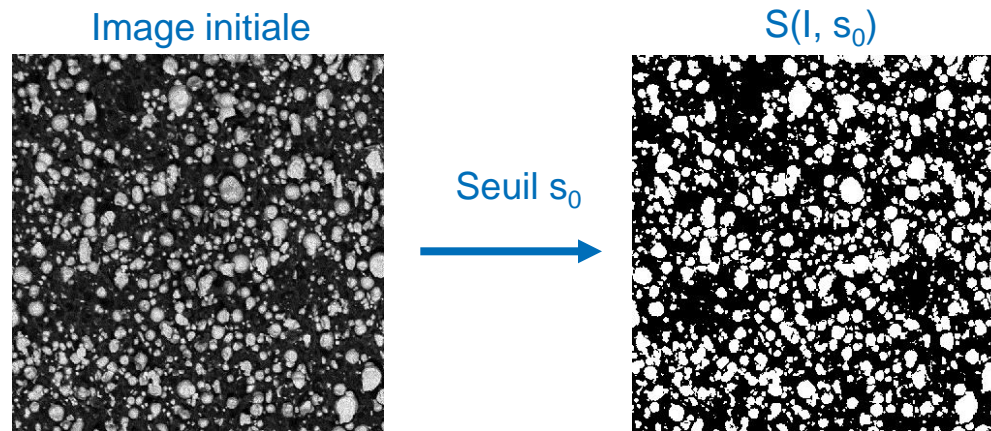
$$V(s_0) = \max_{s \in [0, 255]} V(s)$$

Schéma booléen

Exemple d'application (1)

Segmentation binaire de l'image (matrice – grains)

Seuillage par maximisation de la variance interclasse



$$V(s) = (M_0^s - M)^2 \frac{N_0^s}{N} + (M_1^s - M)^2 \frac{N_1^s}{N}$$

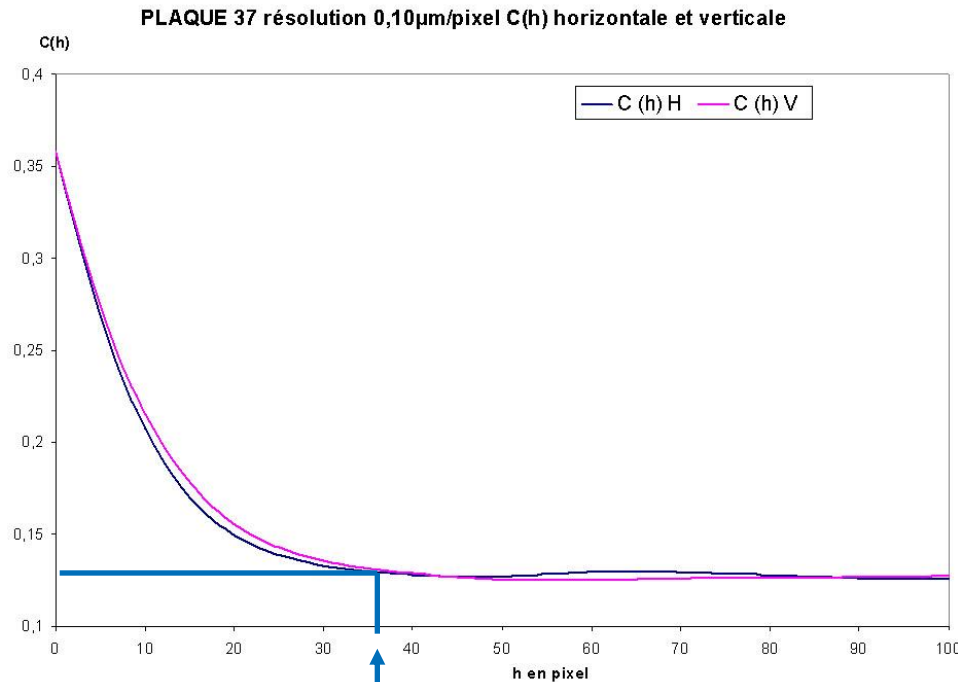
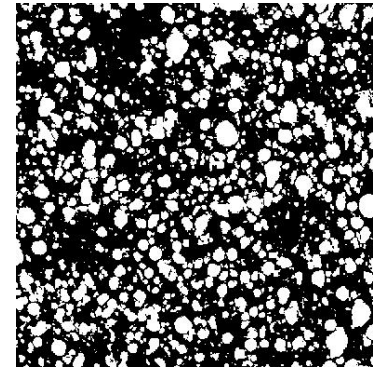
$$V(s_0) = \underset{s \in [0, 255]}{\text{Max}} V(s)$$

Schéma booléen

Exemple d'application (1)

Mesure de la covariance

Que peut on dire sur la répartition des particules ?



portée: taille moyenne des grains

- l'isotropie de la structure (courbes similaires)
- observation à une échelle convenable
- pas d'agréats

Schéma booléen Exemple d'application (1)

Calage d'un modèle

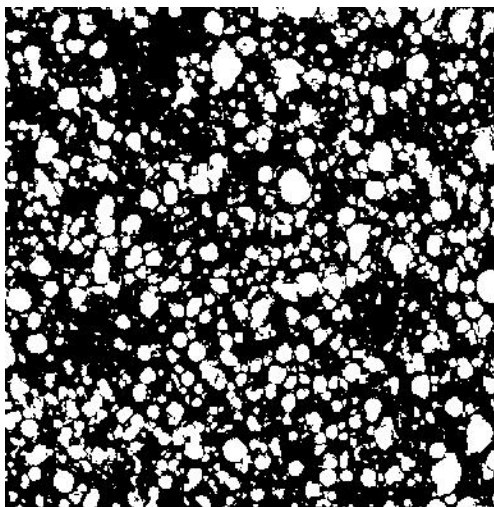


schéma booléen de sphères?

Schéma booléen Exemple d'application (1)

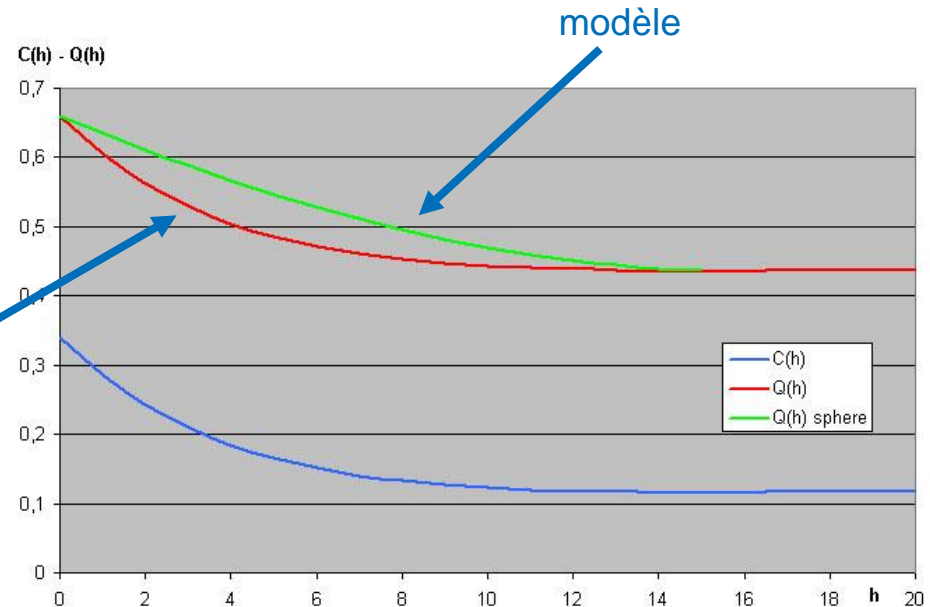
Calage d'un modèle

schéma booléen de sphères

$$Q(h) = 1 - 2p + C(h) = q^{2-r(h)}$$

$$r(h) = 1 - \frac{3}{4} \frac{h}{r} + \frac{1}{16} \frac{h^3}{r^3} \quad \text{Pour } h \leq 2r$$

mesurée

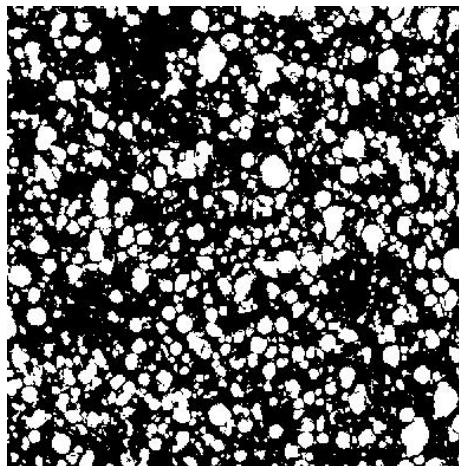


→ pas très concluant...

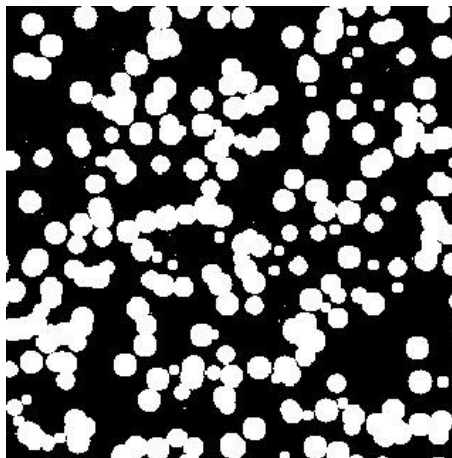
Schéma booléen

Exemple d'application (1)

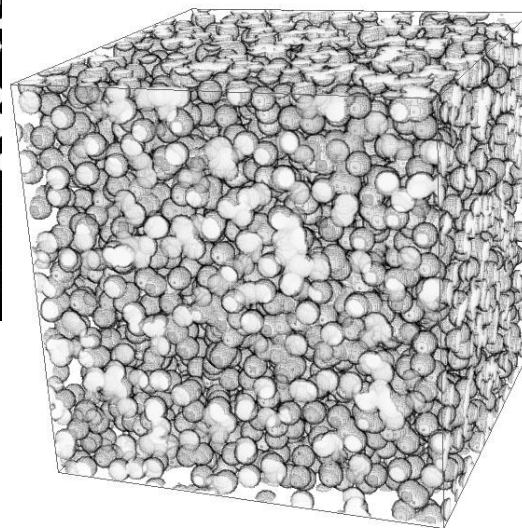
Calage d'un modèle



réel



modèle



En effet...

Schéma booléen Exemple d'application (1)

Calage d'un modèle

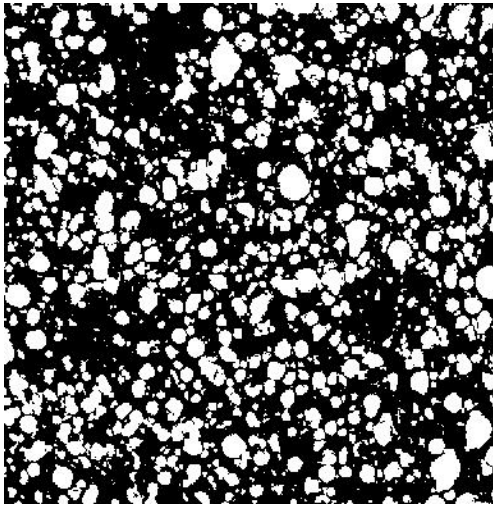


schéma booléen de sphères
rayon suivant une loi
exponentielle?

Schéma booléen

Exemple d'application (1)

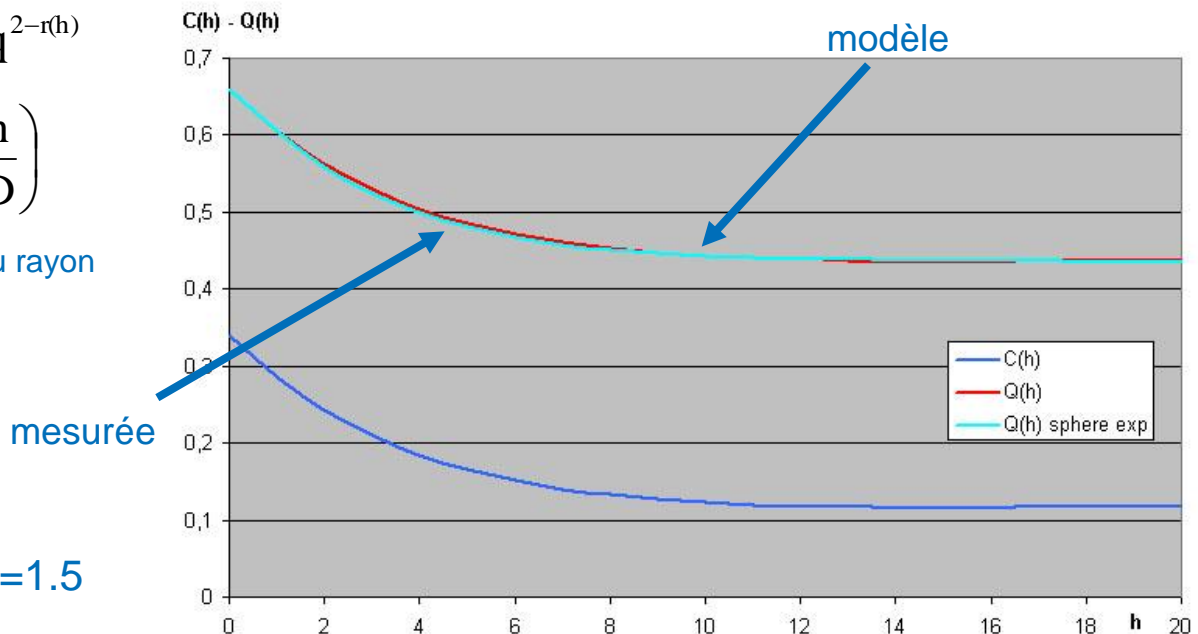
Calage d'un modèle

schéma booléen de sphères - rayon suivant une loi exponentielle

$$Q(h) = 1 - 2p + C(h) = q^{2-r(h)}$$

$$r(h) = \left(1 + \frac{h}{2D}\right) \exp\left(\frac{h}{D}\right)$$

Pour $h > 0$, D paramètre lié au rayon



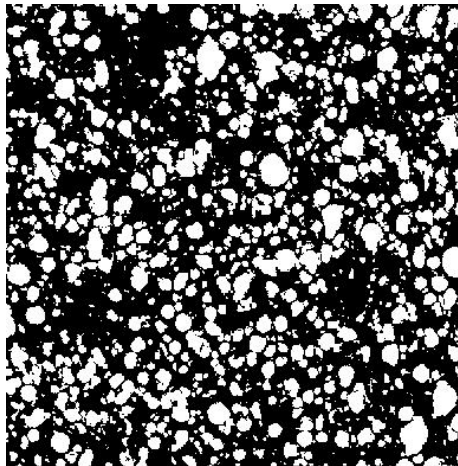
fit bon avec $D=1.5$

→ covariances mesurée et modèle très proches

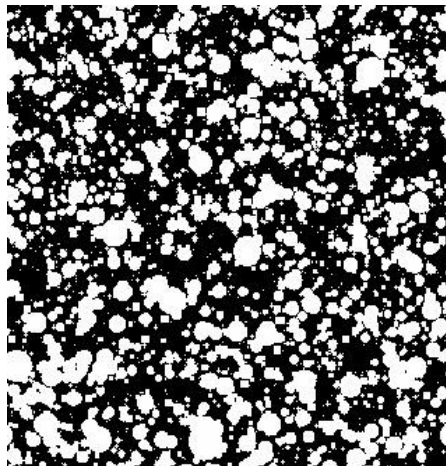
Schéma booléen Exemple d'application (1)

Calage d'un modèle

schéma booléen de sphères - rayon suivant une loi exponentielle

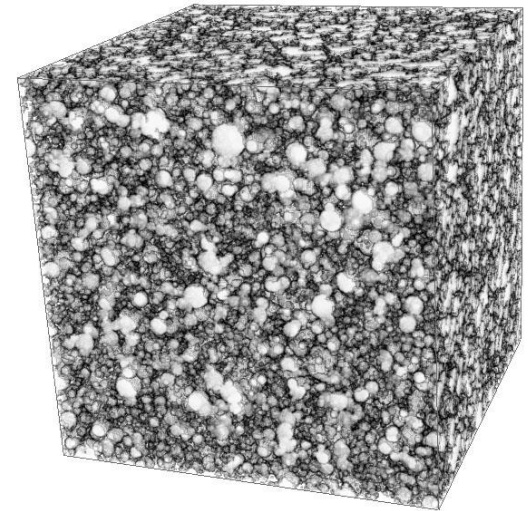


réel



modèle

Visuellement très proche



pour la simulation 3D :

$$\theta = \frac{-\ln(1 - V_v)}{\bar{V}(A')} \quad \bar{V}(A') = 8D^3$$

Schéma booléen

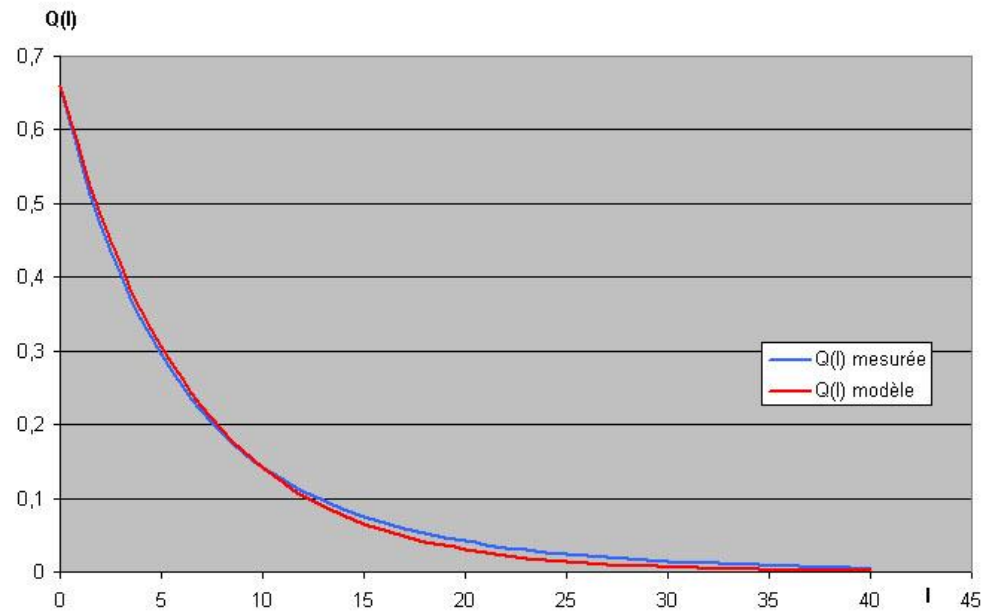
Exemple d'application (1)

Vérification de la validité du modèle

Utilisation de $Q(l)$: comparaison entre $Q(l)$ mesurée sur images réelles et $Q(l)$ mesurées sur images simulées

$$Q(l) = \mu(A^c \ominus l)$$

$$Q(l) = q^{1 - \ln(0)} = q^{1 + \frac{1}{2D}}$$



→ OK

Schéma booléen

Exemple d'application (1)

un peu de probabilité...

Génération des sphère : tirage au sort du rayon suivant une loi exponentielle de paramètre D

Soit x diamètre de la sphère, f densité de proba., F fonction de répartition :

$$f(x) = \frac{1}{D} e^{-\frac{1}{D}x} \quad F(x) = 1 - e^{-\frac{1}{D}x}, F(x) \in [0; 1]$$

Expression de x en fonction de F(x):

$$x = -D \ln(1 - y) \text{ avec } y = F(x)$$

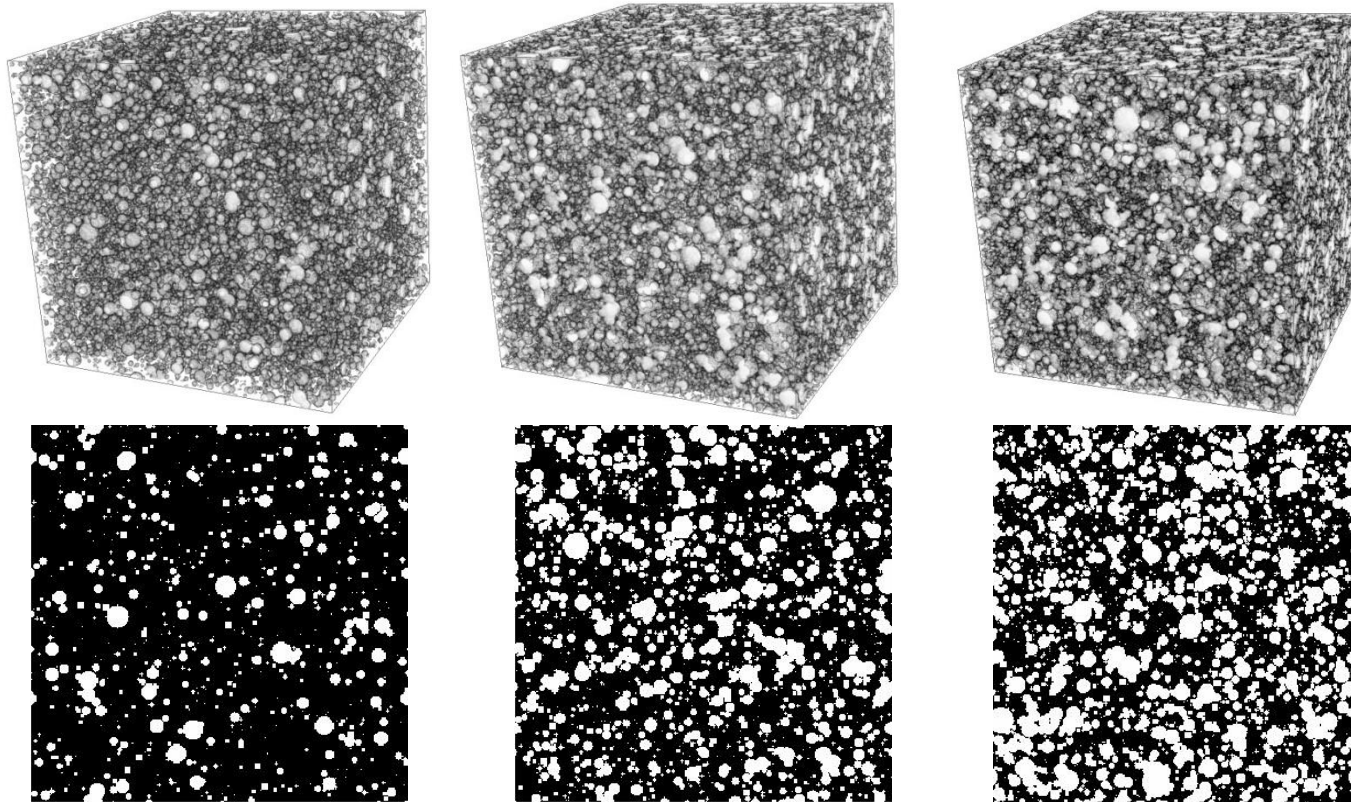
Générer y à partir de U entre 0 et 1 $\rightarrow x$

Schéma booléen

Exemple d'application (1)

Création de nouveaux matériaux virtuels

Variation de V_v (quantité de poudre de fer carbonyle)



$V_v=0.1$

$V_v=0.25$

$V_v=0.34$

Schéma booléen

Exemple d'application (1)

Création de nouveaux matériaux virtuels
changement de loi pour les rayons -loi Gamma...-
(type de poudre de fer carbonyl)

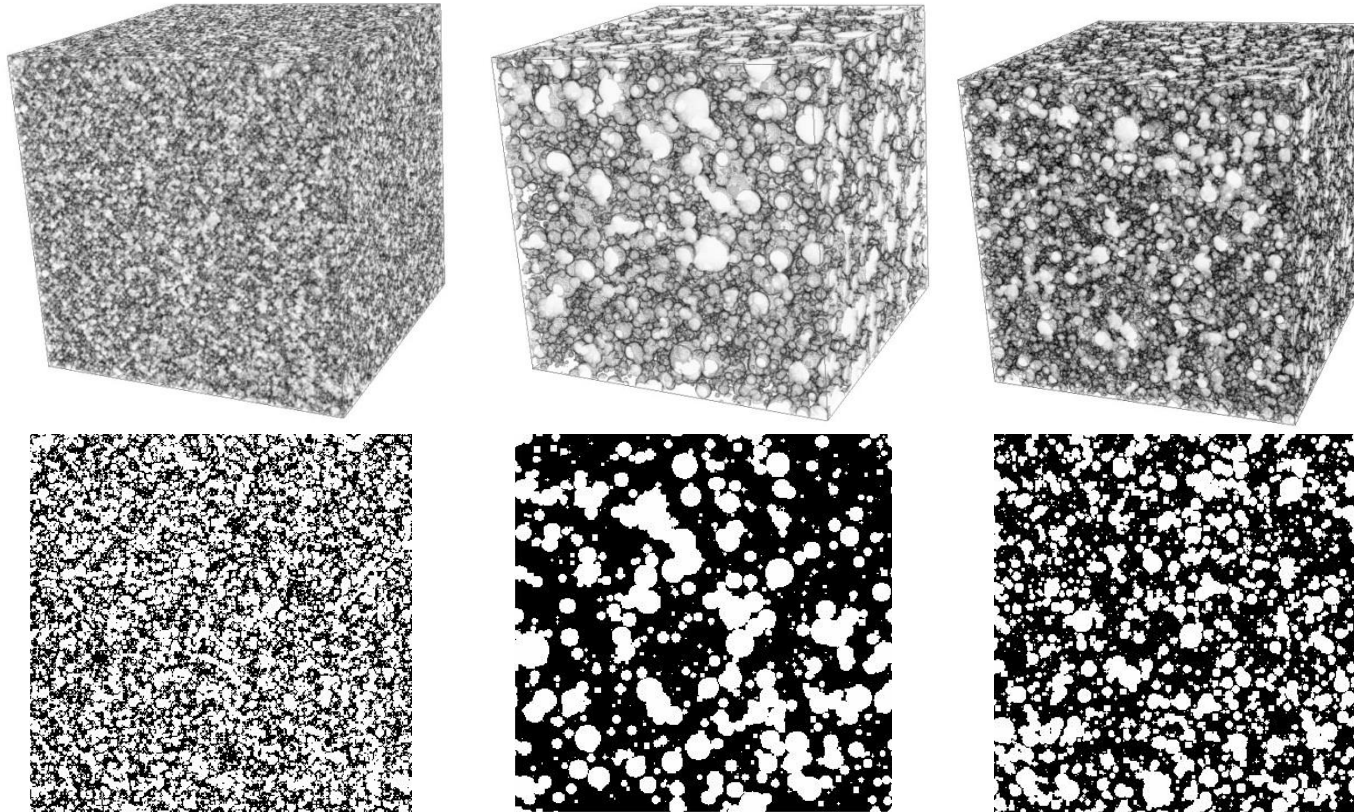


Schéma booléen

Exemple d'application (2)

Création de nouveaux matériaux virtuels

Variation de la distribution spatiale (mélange): utilisation de modèle multi-échelle

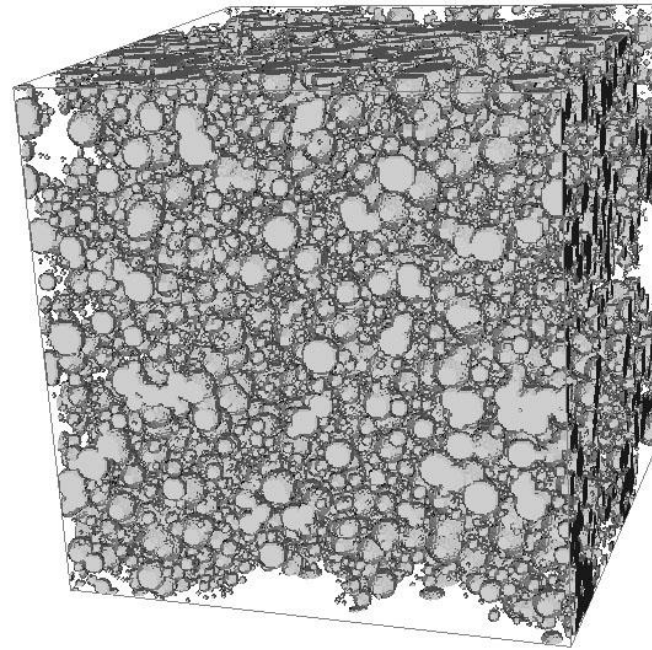
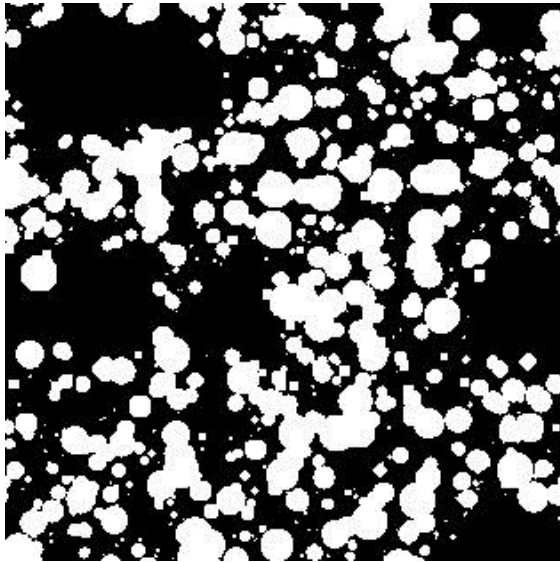


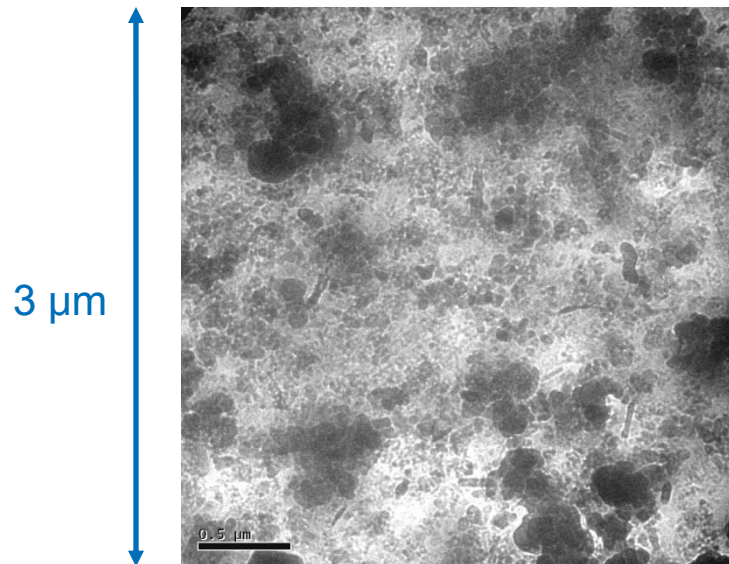
Schéma booléen

Exemple d'application* (2)

Matériaux nanocomposites matrice élastomère, charge noir de carbone

But : caractériser l'arrangement de la structure en fonction du temps de préparation: mélange du noir de carbone dans la matrice 2 et 12 minutes

Problème: accès limité à une information 2D (MET coupe épaisse)



*M. Moreaud, Propriétés morphologiques multi-échelles et prévision du comportement diélectrique de nanocomposites, Thèse Ecole des Mines de Paris, 2006.

Schéma booléen

Exemple d'application (2)

Segmentation binaire charge - matrice

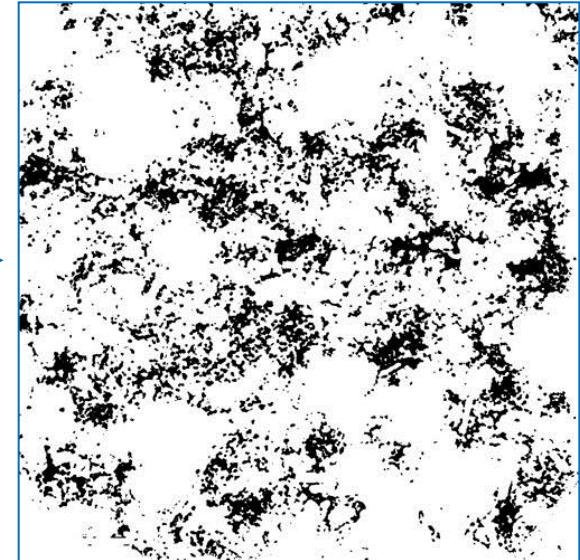


Schéma booléen

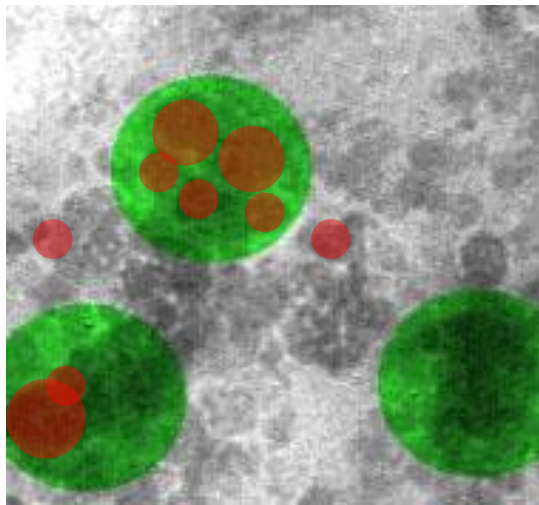
Exemple d'application (2)

Les grains de la charge : tailles variées avec une forte proportion de grains de petites tailles et globalement sphérique.

→ schéma Booléen de sphères dont les rayons suivent une loi exponentielle

Regroupement en agrégats : simulation multi-échelle

→ schéma Booléen de sphères de rayon constant pour les agrégats

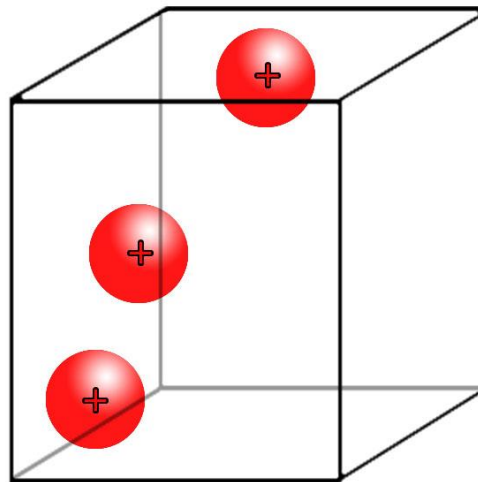


Prise en compte du travail sur lame épaisse

Schéma booléen

Exemple d'application (2)

Regroupement en agrégats



Simulation par modèle de Cox 2 échelles:
Conservation des sphères dont le centre est à l'intérieur des
sphères modélisant les agrégats

Schéma booléen

Exemple d'application (2)

Modèle multi-échelle

$$C^*(h) = (1 - 2q_1^* + q_1^{*2-r_1(h)}) (1 - 2q_2 + q_2^{2-r_2(h)})$$

5 paramètres :

e : épaisseur de l'échantillon

D : paramètre de la loi exponentielle du rayon des sphères modélisant les grains

R : rayon des sphères modélisant les agrégats

q_2 : Vv du complémentaire des agrégats,

q_1^* : Vv apparente du complémentaire de l'échelle des grains permettant de remonter à l'estimation p_1 Vv réelle en utilisant une formule de correction d'épaisseur

$$p_1 = 1 - q_1 = 1 - q_1^* \frac{1}{1 + \frac{e}{4D}}$$

Schéma booléen

Exemple d'application (2)

Ajustement du modèle

Paramètres du modèle aléatoire multi-échelles avec correction d'épaisseur:

	Prélèvement 2 minutes	Prélèvement 12 minutes
épaisseur	73 nm	85 nm
Diamètre moyen charge (loi exp.)	15 nm	15 nm
Diamètre agrégats	240 nm	180 nm
Vv charge	0.42	0.42
Vv agrégats	0.85	0.85
Vv du matériau	0.36 (0.73*)	0.36 (0.77*)

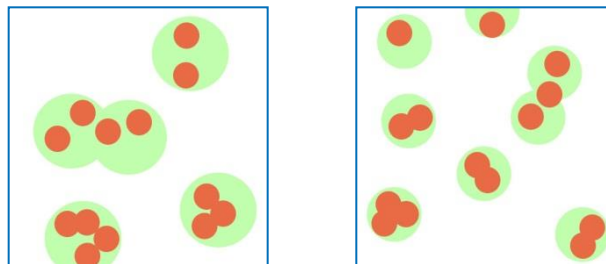
*: Vv apparente sur coupe mince

Schéma booléen

Exemple d'application (2)

Résultat

Entre les 2 prélèvements :   des agrégats → meilleure dispersion de la charge pour un temps de mélange + élevé

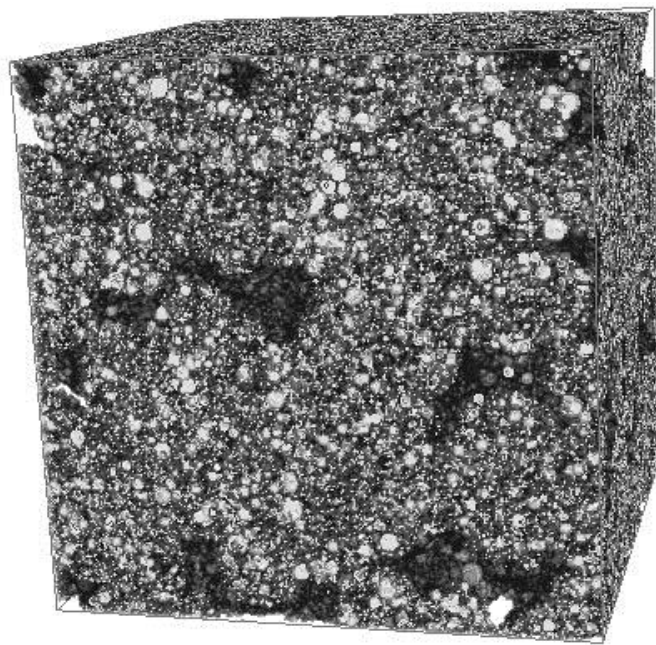


	2 minutes	12 minutes
épaisseur	73 nm	85 nm
Diamètre moyen charge (loi exp.)	15 nm	15 nm
Diamètre agrégats	240 nm	180 nm
Vv charge	0.42	0.42
Vv agrégats	0.85	0.85
Vv du matériau	0.36 (0.73*)	0.36 (0.77*)

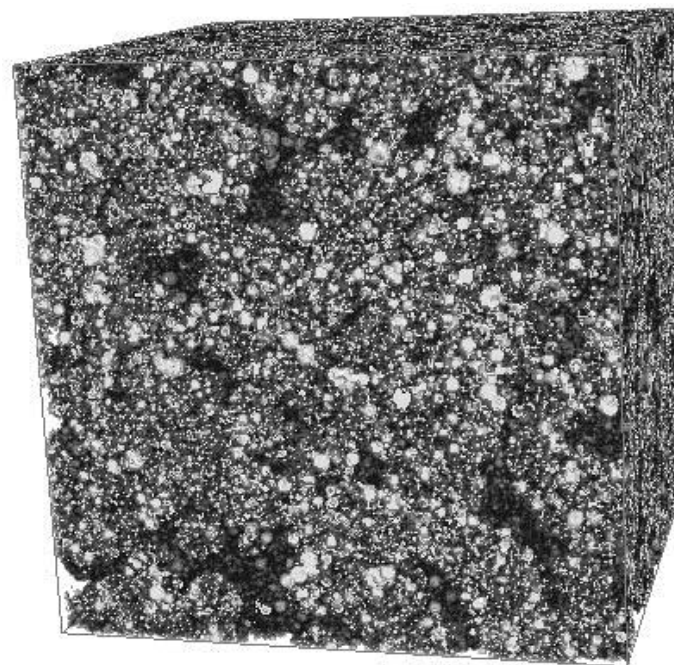
Schéma booléen

Exemple d'application (2)

Simulation 3D



Prélèvement 2 minutes



Prélèvement 12 minutes