

Etude numérique par FFT et analyse morphologique 3D des points chauds dans les milieux granulaires

François Willot, Luc Gillibert, Dominique Jeulin

► **To cite this version:**

François Willot, Luc Gillibert, Dominique Jeulin. Etude numérique par FFT et analyse morphologique 3D des points chauds dans les milieux granulaires. 20ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2011, Besançon, France. pp.574-579. hal-00878998

HAL Id: hal-00878998

<https://hal-mines-paristech.archives-ouvertes.fr/hal-00878998>

Submitted on 31 Oct 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Étude numérique par FFT et analyse morphologique 3D des points chauds dans les milieux granulaires

F. Willot^a, L. Gillibert^a, D. Jeulin^a

a. Centre de Morphologie Mathématique, Mathématiques et Systèmes, Mines ParisTech,
35 rue Saint-Honoré, 77305 Fontainebleau Cedex, France.

Résumé :

Ce travail s'intéresse aux réponses élastique et thermique locales d'un composite désordonné de type granulaire. Une image 3D d'un échantillon de propergol, formée de grains sphéroïdes, est segmentée grâce à des outils de morphologie mathématique, et les champs élastiques et thermiques locaux calculés à l'aide d'un outil d'homogénéisation numérique par transformées de Fourier (FFT), permettant de résoudre les équations de l'élasticité linéaire et les lois de Fourier. Même à faible contraste de propriété entre grains et matrice, c'est-à-dire pour un rapport des conductivités thermiques et des modules élastiques grains/matrice de l'ordre de deux, la microstructure granulaire dense induit des "points chauds relatifs" : le flux thermique est élevé dans les zones situées entre grains voisins, lorsque la normale aux surfaces grains-matrice est parallèle au gradient de température macroscopique. La trace du champ de déformation présente également des points chauds moins marqués après sollicitation en compression hydrostatique.

Abstract :

This work presents a combined image segmentation and numerical study of the local elastic and thermal fields occurring in a propergol composite, a granular medium containing dense self-assembled spheroidal grains embedded in a matrix. A 3D microtomography image of a representative sample is segmented using morphological operators. For the elastic moduli and thermal conductivity, a low matrix/grains contrast of properties is considered. The strain and stress fields, as well as the temperature and local heat flux, are determined numerically using the "FFT method". Even at low contrast of properties, the heat flux concentrates in hot-spot zones located in-between grains that are close to each other, at places where the normal to the matrix-grain interface is parallel to the macroscopic temperature gradient.

Mots clefs : Homogénéisation ; FFT ; milieux granulaires

1 Segmentation d'un milieu granulaire dense

Un matériau granulaire, le propergol butalite, est constitué de grains sphéroïdes, dont le rayon moyen est d'environ 400 microns, enrobés dans une matrice. Des images 3D de taille $1000 \times 1000 \times 1000$ pixels, sont obtenues par microtomographie à rayon X sur un échantillon (Figs. 1a et 1b). L'image est représentative de la microstructure au sens où ses dimensions sont largement supérieures à la taille moyenne des grains, et macroscopiquement isotrope, en un sens explicité plus bas. Elles font de plus apparaître une forte densité en grains, les inclusions adjacentes étant souvent très proches les unes des autres. Une segmentation de l'image est mise en œuvre ci-dessous dont la finalité est d'étudier la réponse élastique et thermique locale du matériau.

La segmentation de l'image obtenue par microtomographie consiste dans un premier temps à séparer les grains de la matrice, de façon à obtenir une image binaire. Dans un second temps, les grains sont séparés les uns des autres, la résolution spatiale offerte par la microtomographie ne permettant pas de distinguer les zones entre grains très proches. Les images microtomographiques considérées sont

suffisamment contrastées, de sorte que les grains peuvent être séparés de la matrice à l'aide d'un simple seuillage. L'histogramme des intensités des pixels permet de déterminer automatiquement un seuil, selon la méthode d'Otsu de maximisation de la variance interclasse [10] (voir également [4] pour la segmentation de mortier par cette même méthode). Le résultat de cette segmentation, appelée "microstructure connectée" (C), est illustré sur la Fig. 1c. D'après la segmentation obtenue, la densité en grains est de 61,32% sur l'échantillon.

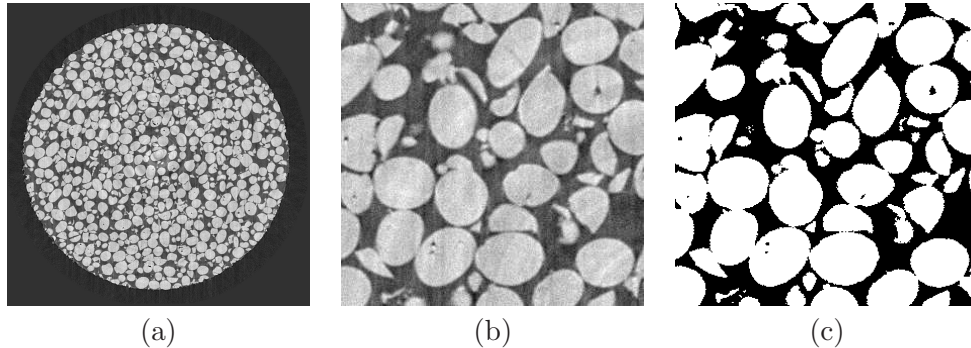


FIG. 1 – Coupe d'une microtomographie à rayon X d'un échantillon de propergol butalite (a) ; détail (b) ; image seuillée par la méthode d'Otsu de maximisation de la variance interclasse, aboutissant à la "microstructure connectée" (c).

2 Séparation des grains : ligne de partage des eaux stochastiques

Une segmentation plus avancée des images est décrite ci-dessous, permettant d'identifier chaque grain et de le déconnecter de ses voisins, appelée "microstructure non connectée" (NC). Les grains sont séparés les uns par rapport aux autres grâce à la ligne de partage des eaux stochastique (LPES), une méthode automatique bien adaptée aux matériaux granulaires [5]. Dans sa version originelle, la ligne de partage des eaux [2] consiste à inonder à partir d'un ensemble de marqueurs donnés le gradient morphologique de l'image, vu comme relief topographique. L'image est alors partitionnée en bassins versants. Dans sa version stochastique, la LPES est obtenue à partir de marqueurs aléatoires [1]. Les marqueurs, dont le nombre est connu, sont ponctuels et suivent une distribution uniforme. Il en résulte une fonction de densité de probabilité des frontières, estimée à partir d'un grand nombre de réalisations. Pour appliquer la LPES à l'image de propergol, le nombre de marqueurs, égal au nombre de grains, doit être estimé. L'estimation du rayon puis du nombre de grains est faite à l'aide de la covariance de l'image, par comparaison avec un modèle de sphères Booléennes comme indiqué dans [7].

Le temps de calcul des contours par cette méthode se révèle cependant prohibitif pour des images de cette taille, 100 à 200 réalisations à partir de marqueurs aléatoires étant nécessaires pour une bonne estimation de la fonction de densité de probabilité des contours [1]. Une approche basée sur les graphes [11] permet de réduire la complexité du processus. Les probabilités de frontières entre grains sont approximées par le volume des régions constituant l'image. Une première ligne de partage des eaux est calculée sur le gradient de l'image d'entrée en utilisant les minimas locaux comme marqueurs. Afin de réduire le nombre de régions, un unique marqueur de fond est utilisé pour la matrice, obtenu à partir de l'image seuillée. Cette ligne de partage donne une sur-segmentation de l'image d'entrée qui est ensuite transformée en graphe. Pour cela, un sommet est associé à chaque bassin versant et les bassins versants se touchant dans l'image sont reliés par une arête. Il est ensuite possible de fusionner les sommets deux par deux, en commençant par les sommets correspondant à des régions séparées par la frontière de plus fort gradient. Lors de la fusion de deux sommets, la probabilité associée à la frontière entre ces deux sommets est estimée par [8] :

$$1 - (1 - V_1/V)^k - (1 - V_2/V)^k + [1 - (V_1 + V_2)/V]^k$$

soit la probabilité d'obtenir au moins un marqueur aléatoire dans chacune des deux régions de volume V_1 et V_2 où V est le volume total de l'image et k le nombre de marqueurs. La fonction de densité de

probabilité obtenue est seuillée à 25% afin de conserver les frontières les plus probables. La séparation des grains permet de générer une microstructure “segmentée” où chaque grain est séparé de ses voisins. Celle-ci est obtenue en assignant à chaque pixel situé sur les frontières de la LPES la phase matrice. La densité en grains sur la microstructure ainsi obtenue est de 53.74% contre 61.33% pour la microstructure d’origine. Les principales étapes de la LPES jusqu’à la “microstructure non connectée” sont illustrées sur la Fig. 2.

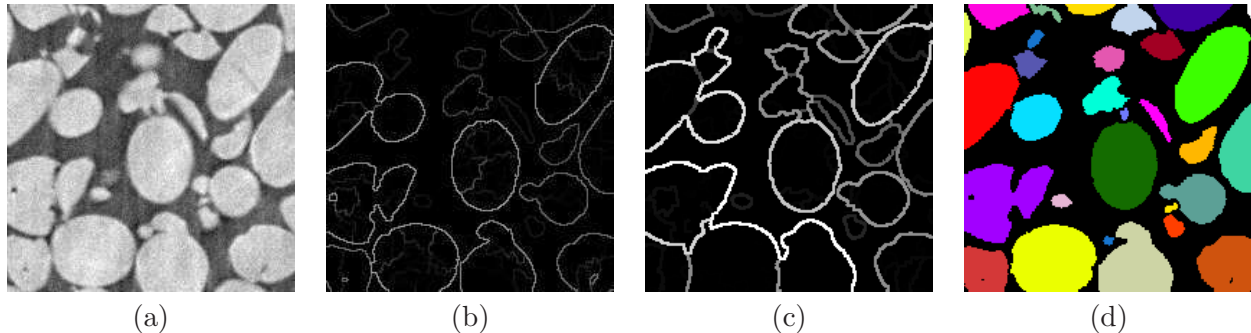


FIG. 2 – Coupe de l’image à niveau de gris (détail, a) ; fonction de densité de probabilité des contours estimée avec 50 réalisations d’un processus de point de Poisson (b) et avec l’approche à base de graphes (c) ; segmentation avec grains déconnectés, aboutissant à la “microstructure non connectée” (d).

3 Réponse élastique linéaire et conductivité thermique

La réponse linéaire élastique et les propriétés de conductivité thermique du propergol sont examinées dans le cadre des problèmes classiques d’homogénéisation de milieux hétérogènes :

$$\phi_i(\mathbf{x}) = -\lambda(\mathbf{x})\partial_i T(\mathbf{x}), \quad \partial_i \phi_i(\mathbf{x}) \equiv 0, \quad (1)$$

$$\sigma_{ij}(\mathbf{x}) = \mathbb{L}_{ij,kl}(\mathbf{x})\varepsilon_{kl}(\mathbf{x}), \quad \partial_i \sigma_{ij}(\mathbf{x}) \equiv 0 \quad \varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) = (1/2) [\partial_i u_j(\mathbf{x}) + \partial_j u_i(\mathbf{x})] \quad (2)$$

où ϕ est le vecteur flux de chaleur, T la température, σ , ε et u les tenseurs de déformation et de contrainte et le vecteur déplacement, respectivement. De plus, les conductivités thermiques λ et tenseurs d’élasticité locaux \mathbb{L} sont donnés par :

$$\lambda(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0.15048 & \text{(matrice)} \\ 0.6087 & \text{(grains)} \end{cases} \quad \mathbb{L}_{ij,kl} = \mathbb{L}_{ij,kl} \times \begin{cases} 1 & \text{(matrice)} \\ 2 & \text{(grains)} \end{cases} \quad (3)$$

où $\mathbb{L}_{ij,kl}$ est le tenseur symétrique unité d’ordre 4. Les valeurs des conductivités thermiques correspondent aux valeurs physiques réelles exprimées en J/mKs, tandis que les modules élastiques sont choisis arbitrairement. Le contraste de propriétés, i.e. le rapport des conductivités thermiques ou des modules élastiques entre grains et matrice, est du même ordre dans les deux cas. Il n’y a pas de couplage entre les problèmes thermiques et élastiques qui sont donc résolus indépendamment.

Des conditions aux bords périodiques sont appliquées sur la microstructure segmentée, prise comme la cellule élémentaire d’un milieu périodique : par exemple les flux et vecteur $\phi \cdot \mathbf{n}$ et $\sigma \cdot \mathbf{n}$, où \mathbf{n} est la normale au bord de la cellule dirigée vers l’extérieure, sont anti-périodiques. Les propriétés effectives du matériau sont définis par :

$$\langle \phi_i(\mathbf{x}) \rangle = -\lambda_{ij}^{(0)} \langle \partial_j T(\mathbf{x}) \rangle, \quad \langle \sigma_{ij}(\mathbf{x}) \rangle = \mathbb{L}_{ij,kl}^{(0)} \langle \varepsilon_{kl}(\mathbf{x}) \rangle. \quad (4)$$

Pour compléter les conditions de périodicité des champs, un gradient de température moyen est imposé dans une des trois directions x , y ou z ($\langle \partial_i T(\mathbf{x}) \rangle = \delta_{ij}$ pour $j = 1, 2, 3$, resp.). En élasticité, le matériau est soumis à un chargement en déformation hydrostatique ou en cisaillement, resp. $\langle (1/3)\varepsilon_{ii}(\mathbf{x}) \rangle = 1$ et $\langle \varepsilon_{12}(\mathbf{x}) \rangle = 1$. Ces équations sont résolues numériquement grâce à la méthode par transformée de Fourier rapide [9]. Ne nécessitant pas de maillage, bien adaptée aux images de grande taille [13], celle-ci est directement appliquée aux images de tailles 920^3 pixels des microstructures connectées (C) et non connectées (NC). La loi de comportement est imposée sur chaque pixel tandis que les équations de conservation du flux et d’équilibre des contraintes sont prescrites dans le domaine de Fourier.

4 Propriétés effectives

Du point de vue du comportement thermique, le matériau est macroscopiquement isotrope. Les calculs par FFT donnent comme propriétés apparentes, pour la microstructure (C) :

$$\lambda_{11}^{(0)} = 0.3888, \quad \lambda_{22}^{(0)} = 0.3877, \quad \lambda_{33}^{(0)} = 0.3864,$$

soit $\lambda_{ij}^{(0)} \approx \bar{\lambda} \delta_{ij}$ avec $\bar{\lambda} \approx 0.387 \pm 0.0015$. Par comparaison les bornes de Hashin-Shtrikman indiquent $0.368 < \bar{\lambda} < 0.415$ et l'estimation du modèle auto-cohérent défini à partir de la formulation variationnelle de Hashin-Shtrikman $\bar{\lambda} \approx 0.4036$. La précision donnée pour $\bar{\lambda}$, de 0.04% ici, est calculée grâce au volume élémentaire représentatif et à la portée intégrale qui vaut environ 133 pixels. Celle-ci est reliée à la variance de la conductivité thermique apparente sur des sous-volumes, comme indiqué dans [12]. Le même degré de précision est obtenue pour la conductivité thermique macroscopique de la microstructure (NC), de l'ordre de 0.3306 ± 0.002 . Les propriétés thermiques effectives du matériau ne sont pas sensible aux caractéristiques de connexion des grains, les différences observées étant proportionnelles aux différences de fractions volumiques engendrées par la deconnexion.

Concernant la réponse en élasticité linéaire, les calculs numériques sont cohérents avec un matériau macroscopiquement isotrope. Les résultats obtenues par FFT sont $\mu^{(0)} = 0.6534$ et $\kappa^{(0)} = 0.4455$ pour les module de cisaillement et de compression resp., en bon accord avec les bornes de Hashin-Shtrikman qui indiquent $0.6457 < \mu^{(0)} < 0.6581$ et $0.4404 < \kappa^{(0)} < 0.4482$.

5 Cartes des champs et propriétés locales

On s'intéresse à la localisation dans la microstructure granulaire des propriétés extrêmes des champs thermiques et élastiques. Les cartes de la composante $\partial_x T(\mathbf{x})$ du gradient de température parallèle au champ macroscopique appliqué ($\langle \partial_i T(\mathbf{x}) \rangle = \delta_{i1}$), calculées par FFT, sont représentées en Fig. 3. Celles-ci font apparaître des zones de concentration du champ dans les interstices de la matrice situées entre certains grains, à la fois pour la microstructure connectée (a) et non connectée (b). Ces points chauds ne sont pas la conséquence d'artefacts numériques (phénomène de Gibbs) : un calcul par FFT a été effectuée sur une microstructure à plus faible résolution (c), où l'on conserve un seul pixel sur chaque cube de $2 \times 2 \times 2$ pixels de la microstructure connectée. La localisation des points chauds ainsi que leur intensité n'est pas modifiée.

Par ailleurs, l'examen visuel des cartes des champs montre que ces zones chaudes sont ponctuelles (et non linéaires) et apparaissent entre grains proches, lorsque la normale à l'interface matrice/grains est parallèle au champ appliqué (dirigé verticalement sur les images de la Fig. 3). L'intensité de ces points chauds est plus faible sur la microstructure non connectée, lorsque la distance minimale entre grains adjacents augmente. Pour quantifier ces résultats, les points chauds de la composante $\partial_x T(\mathbf{x})$ sont extraits par seuillage des cartes des champs (Fig. 3d). Le seuil est déterminé à partir de la probabilité de distribution du champ $P_{\partial_x T}(t)$ dans la matrice, représentée à gauche de la Fig. 4, ici de l'ordre de 2, pour une moyenne dans le matériau valant 1. La matrice est ensuite érodée à l'aide de sphères de taille croissante d . La proportion en volume $V(f)$ de points chauds dans la matrice érodée, par rapport au volume total de points chauds, est représentée à droite de la Fig. 4, pour les microstructures connectées et non connectées. Celle-ci montre que les points chauds se situent dans leur grande majorité entre sphères proches. Une étude récente [4] a montré, par des méthodes numériques, que les zones de contrainte importante étaient préférentiellement situés à l'intérieur de la matrice dans un mortier dont les granulats étaient très rigides comparés au ciment. Dans les champs thermiques obtenus ici, il apparaît que les extrema des champs sont situés parfois à l'interface entre grains et matrice, et parfois à l'intérieur de la matrice (non représenté).

En élasticité linéaire, des coupes du champ de déformation locale ε_m et ε_{xy} sont représentées sur la Fig. 5, correspondant aux deux modes de chargement en compression hydrostatique et en cisaillement. En compression hydrostatique, les maxima du champ de déformation moyen sont situés dans les interstices entre grains proches, cependant ces zones de concentration de la déformation sont moins prononcées et plus nombreuses que les zones observées pour le gradient de température. En particulier, en l'absence

de direction privilégiée, les interfaces grains/matrice autour des zones où se situent les maxima du champ de déformation sont orientés indifféremment. En cisaillement, en revanche, aucun des résultats obtenus précédemment ne se généralise : les maxima du champ de déformation ε_{xy} ne sont pas situés dans les interstices entre grains proches, et le champ varie de manière plus marqué dans la matrice.

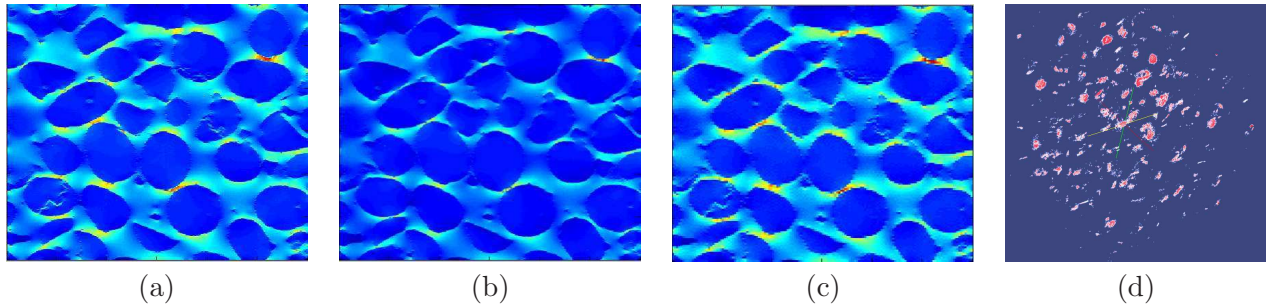


FIG. 3 – Carte de la composante du gradient de température $\partial_x T(\mathbf{x})$ sur une coupe $z = cste$ (x et y dirigés de haut en bas et de gauche à droite resp.) : microstructure connectée (a) et non connectée (b), et microstructure connectée avec résolution divisée par 2 (c). La composante $\partial_x T(\mathbf{x})$ est parallèle au champ appliqué, i.e. $\langle \partial_i T(\mathbf{x}) \rangle = \delta_{i1}$. À droite (d), image 3D des points chauds, obtenue par seuillage.

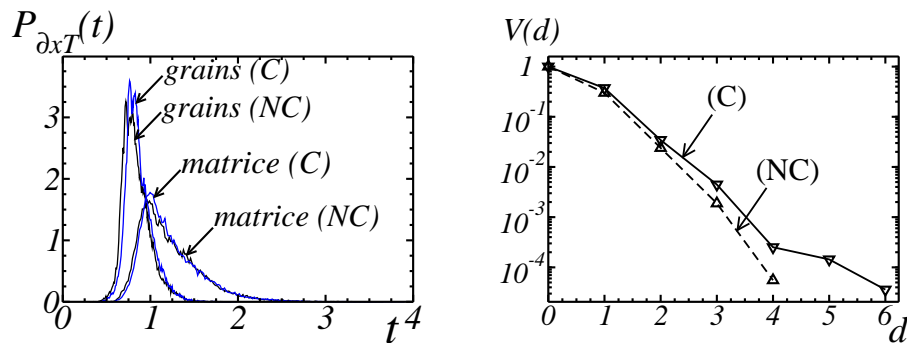


FIG. 4 – À gauche, distribution de probabilité $P_{\partial_x T}(t)$ des valeurs de la composante du gradient de température $\partial_x T(\mathbf{x})$ parallèle au champ appliqué, dans les grains et dans la matrice, pour les microstructures connectées (C) et non connectées (NC) en bleu et noir resp.; à droite, proportion de points chauds dans la matrice $V(d)$, en volume, restant après une érosion de taille d pour les microstructures connectées (C) et non connectées (NC).

6 Conclusions

Le seuillage par la méthode d'Otsu et la ligne de partage des eaux stochastique (LPES) permet de segmenter rapidement des images de milieux granulaires de grande taille, et d'en séparer les grains. Pour un contrastes de propriétés de l'ordre de 2, la méthode par FFT permet le calcul du comportement élastique et thermique effectif avec une précision de l'ordre de 0,4%. En ce qui concerne la réponse locale du matériau, même à faible contraste de propriétés entre grains et matrice, les cartes 3D des champs font apparaître des points chauds autour desquels le flux thermique est grand par rapport à sa valeur moyenne. Ces points chauds sont induits par la microstructure granulaire dense mais sont un phénomène local, au sens où ces zones sont situées dans les régions intermédiaires entre grains très proches, lorsque la normale à l'interface grains-matrice est parallèle au gradient de température macroscopique. De plus, la valeur du flux thermique sur ces points chauds augmente lorsque la distance entre grains diminuent (voir [6] pour une étude en électrostatique de l'influence de la distance entre inclusions, dans le cas d'un arrangement périodique). Ces résultats se généralisent dans le cas d'un chargement en compression, pour les valeurs maximales de la trace du tenseur de déformation, mais pas au cas d'un chargement en cisaillement. En présence de frottement, ces points chauds pourraient initier une explosion non contrôlée [3].

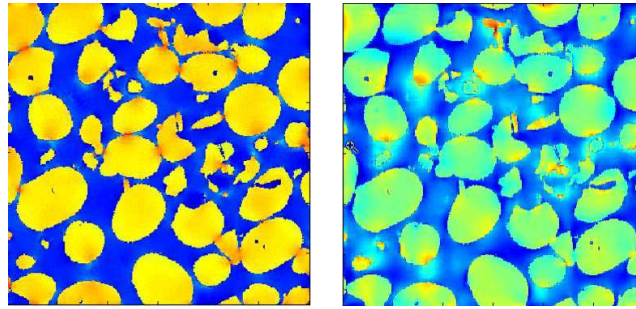


FIG. 5 – Carte des composantes du tenseur de déformation ε_m (gauche) et ε_{xy} (droite) parallèles au champ appliqué, pour un chargement en déformation hydrostatique ou en cisaillement dans la direction x , y , resp. Les zones de champs maximales sont en rouge, et les valeurs les plus faibles en bleu.

Remerciements Cette étude a fait l'objet d'un financement de la DGA (convention n° 92664). Les auteurs remercient A. Fanget (CEA Gramat) pour la fourniture des microtomographies.

Références

- [1] Angulo, J., Jeulin, D. Stochastic watershed segmentation. Proceedings of ISMM'2007, 8th International Symposium on Mathematical Morphology, 265-276. Rio de Janeiro, Brazil (2007).
- [2] Beucher S., Lantuéjoul, C. : Use of watersheds in contour detection. In : International workshop on image processing, real-time edge and motion detection (1979).
- [3] Elban, W.L., Hoffsommer J.C., Coffey, C.S., Yoo, K.C., Rosemeier, R.G., Microstructural origins of hot spots in RDX explosives and a reference inert material. NSWC 84-200 (1984).
- [4] Escoda, J., Willot, F., Jeulin, D., Sanahuja J., Toulemonde, C. : Estimation of local stresses and elastic properties of a mortar sample by FFT computation of fields on a 3D image. To appear (2011).
- [5] Faessel, M., Jeulin, D. : Segmentation of 3D microtomographic images of granular materials with the stochastic watershed. J. of Microscopy, 239, 1 (2010).
- [6] Fleger Y., Rosenbluh M., Strelniker Y.M., Bergman D.J., Lagarkov A.N. *unpublished* (2011).
- [7] Jeulin, D. : Modèles morphologiques de structures aléatoires et de changement d'échelle. Thèse de Doctorat d'État, University of Caen, France (1991).
- [8] Jeulin D. : Remarques sur la segmentation probabiliste, N-10/08/MM, Internal Report, Mines ParisTech (2008).
- [9] Moulinec H., Suquet P., A fast numerical method for computing the linear and nonlinear properties of composites. C.R. Acad. Sci. Paris II 318 (1994).
- [10] Otsu, N. : A threshold selection method from gray-level histograms. IEEE Trans. Sys. Man. Cyber. 9 : 62-66 (1979).
- [11] Stawiaski, J., Meyer, F. : Stochastic watershed on graphs and Hierarchical Segmentation. ECMI 2010.
- [12] Willot, F., Jeulin D., Elastic behavior of composites containing Boolean random sets of inhomogeneities. Int. J. of Engng Sc. 4 2 (2009).
- [13] Willot, F., Jeulin, D., Elastic and electrical behavior of some random multiscale highly-contrasted composites. To appear in Int. J. of Mult. Model. (2011).