

MODÉLISATION DE LA PRÉDICTION DE TRAJETS DE FISSURES SUR LA BASE DE DESCRIPTEURS MORPHOLOGIQUES LOCAUX : APPLICATION À LA GÉNÉRATION DE MICROSTRUCTURES ÉQUIVALENTES DANS LES ÉTUDES DU VIEILLISSEMENT DES MATÉRIAUX CIMENTAIRES

K.Pele¹

J. Baccou^{2,4}, L. Daridon^{3,4}, T. Le Gouic¹, J. Liandrat¹, Y. Monerie^{3,4}, F. Perales^{2,4}

¹ Ecole Centrale de Marseille, ² IRSN/PSN/SEMIA, ³ LMGC, UNIVERSITE MONTPELLIER, CNRS (UMR 5508), ⁴ MIST (IRSN-CNRS-UM)

Mots-clés : microstructure mécanique, fissuration, descripteurs morphologiques, Machine Learning .

1 Introduction

Ce travail s'inscrit dans le cadre des études du vieillissement du béton des enceintes de confinement des centrales nucléaires. Les propriétés thermo-chimio-mécaniques du béton peuvent évoluer au cours du temps, en particulier avec le développement de pathologies telles que les réactions de gonflement (Réaction de Gonflement Interne). Il est ainsi important d'analyser les conséquences de ces modifications, notamment en termes de fissuration qui peuvent dégrader le confinement de l'enceinte. Le béton étant un matériau très hétérogène, son étude nécessite plusieurs simulations sur des microstructures numériques représentatives de la microstructure réelle. La génération de ces microstructures numériques dites équivalentes s'appuie sur l'utilisation de descripteurs morphologiques. Cependant, deux microstructures semblables au sens des descripteurs classiques peuvent présenter des comportements de fissuration différents. Pour contourner cette limitation, nous proposons dans ce travail une nouvelle approche qui combine descripteurs morphologiques et modèle de prédiction de fissure et conduisant à un outil de comparaison entre microstructures adapté à la caractérisation de la fissuration. Après avoir rappelé brièvement la démarche pour générer un béton numérique (Section 2), nous introduisons dans les sections 3 et 4 de nouveaux descripteurs morphologiques ainsi que plusieurs modèles d'apprentissage pour prédire le trajet d'une fissure sans passer par une simulation coûteuse. Une première application de ces développements est réalisée dans la section 5.

2 Génération d'un béton numérique

Plusieurs étapes de traitement sont nécessaires afin d'obtenir un matériau numérique équivalent. Ces étapes sont décrites en détail dans [5]. La caractérisation de l'équivalence repose sur le choix de descripteurs morphologiques [2] tels que le covariogramme qui permet notamment d'étudier la distribution relative des phases d'un milieu aléatoire. Cette quantité notée $C(x, x+h)$ est définie par la probabilité que les points x et $x+h$ soient situés dans la même phase A , ici un granulats :

$$C(x, x+h) = P(x \in A, x+h \in A)$$

Le covariogramme permet de générer, pour une forme donnée de granulats, des bétons numériques possédant notamment : la même fraction volumique des phases matricielles et inclusionnaires, la même distance de répulsion entre les granulats et la même surface spécifique de granulats. Toutefois, deux microstructures semblables au sens de ce descripteur peuvent avoir des faciès de fissuration différents. Dans les deux sections suivantes, nous proposons une approche qui combine nouveaux descripteurs morphologiques et modèles d'apprentissage pour contourner cette limitation.

3 Descripteurs morphologiques pour la fissuration locale

Ces nouveaux descripteurs sont toujours de nature géométriques mais exploitent la configuration locale de la microstructure. En effet, dans le cadre d'une propagation de fissure macroscopiquement en mode I, le trajet de

fissuration est contrôlé par la minimisation de l'énergie de rupture, ce qui va favoriser le passage de la fissure par les interfaces inclusions/matrice (zones de faiblesse) et le contournement des granulats tout en respectant la direction macroscopique de mode I (supposée connue). Pour prendre en compte cette information, nous proposons deux nouveaux descripteurs : l'angle (θ) et la distance (d) aux n granulats les plus proches dans un cône autour de la direction de mode I, chaque granulat écrantant ceux situés en aval de la fissure (FIGURE2). Par ailleurs, un autre descripteur d'appartenance au même granulat (ϵ) est introduit pour distinguer le trajet de la fissure sur un même granulat du trajet entre deux granulats différents.

Pour une microstructure donnée déjà fissurée (FIGURE1), l'évaluation de ces descripteurs nécessite d'abord de discrétiser l'interface matrice/granulat. Par exemple, pour des granulats de forme carrée, 5 points de discrétisation par coté sont considérés. Puis pour chaque point x_0 par lequel passe la fissure, les descripteurs sont évalués pour tous les points situés dans le cône d'écrantage (FIGURE2). Chacun des points est également labelisé en "rejoint" ou "non rejoint" par la fissure à l'étape suivante.

Cette démarche est appliquée à 17 microstructures d'environ 300 granulats chacune dont la fissuration a été réalisée via le logiciel Xper (eXtended cohesive zone models and PERiodic homogenization) (voir FIGURE1) qui permet de simuler la rupture dynamique de matériaux hétérogènes jusqu'à la ruine des structures [1]. L'ensemble des valeurs des descripteurs collectées ainsi que les labels des points correspondants constitue la base d'apprentissage pour construire les modèles de prédiction décrits dans la section 4. Ces résultats sont fournis sur la FIGURE3.

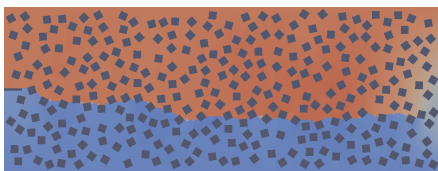


FIGURE 1 – Microstructure simulé par Xper

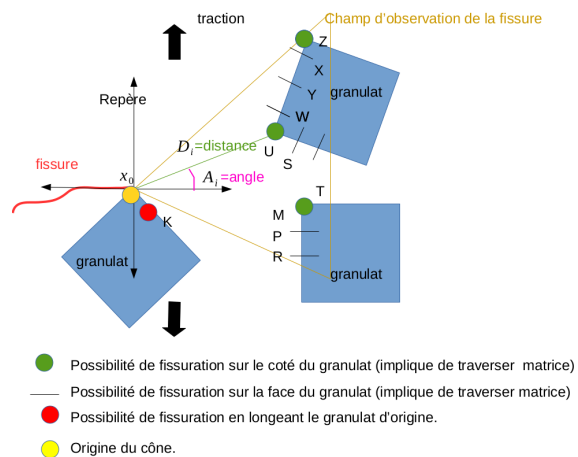
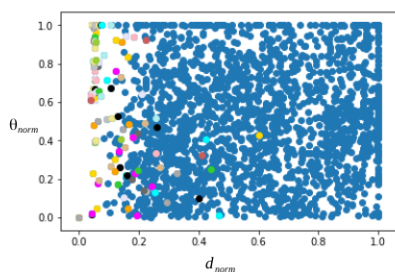
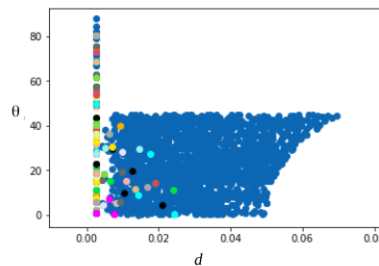


FIGURE 2 – Principe de l'algorithme



(a)



(b)

FIGURE 3 – Valeurs des descripteurs associées à chaque point de discrétisation se situant dans un cône d'écrantage. La couleur bleue représente le label "non rejoint", les autres couleurs le label "rejoint". (a) Descripteurs normalisés par l'angle maximal, resp. la distance maximale, dans le cône d'écrantage, (b) Descripteurs non normalisés.

Il ressort de cette figure que la fissure choisit préférentiellement parmi son voisinage les points dont la distance

est relativement faible. La fissure cherche donc à parcourir le moins de matrice possible, pour atteindre le granulat le plus proche. Par ailleurs, l'angle associé aux points rejoins est élevé en moyenne, ce phénomène est dû au contournement des granulats. En effet, la zone d'interface granulats-pâte de ciment est faiblement résistante, la fissure favorise le contournement des granulats même si cela implique que la direction suivie soit perpendiculaire au sens de l'effort. Cet ensemble de descripteurs traduit donc correctement le comportement de la fissure. Par ailleurs, ces résultats montrent un comportement différent sur le granulat et dans la matrice ce qui suggère deux approches de traitement des descripteurs :

- séparer les descripteurs sur le même granulat $(d_i, \theta_i)_{i \in I_{\text{granulat}}}$, de ceux dans la matrice $(d_i, \theta_i)_{i \in I_{\text{matrice}}}$
- conserver l'ensemble des descripteurs sans séparation $(d_i, \theta_i, \epsilon_i)_{i \in I_{\text{granulat}} \cup I_{\text{matrice}}}$

4 Prédiction du trajet de fissuration

Sur la base des descripteurs morphologiques précédents, nous construisons ici plusieurs modèles d'apprentissage afin de prédire le trajet d'une fissure pour une nouvelle configuration microstructurale. Selon la qualité de la prédiction, il sera alors possible de confirmer la pertinence des descripteurs. De plus, ces résultats apporteront une réflexion sur la nécessité de l'ajout de nouveaux descripteurs complétant ceux présentés. Trois modèles sont développés. Les deux premiers exploitent une modélisation sur la base d'une fonction de vraisemblance. Le troisième s'appuie sur la régression.

Modèles "fonction de vraisemblance"

Soit x_0 le point de départ de la fissure. Une fissure est modélisée par la suite (finie) de points (x_0, \dots, x_n) par laquelle elle passe. à chaque x_i point de la fissure est associé le couple (d_i, θ_i) . Ce dernier correspond à une observation du vecteur aléatoire (D_i, A_i) où D_i et A_i sont les variables aléatoires associées respectivement à la distance et à l'angle.

On suppose ici que ces 2 variables aléatoires sont indépendantes et suivent chacune une loi exponentielle de paramètre λ_1 et λ_2 respectivement. Sous ces hypothèses, le modèle suivant est considéré :

Modèle 1 : Ce modèle intègre les deux premiers descripteurs morphologiques et l'identification de ces paramètres se base sur une séparation de l'ensemble d'apprentissage. La densité prend cette forme :

$$f_1(d, \theta; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4) = \begin{cases} \lambda_1 \lambda_2 \exp^{-\lambda_1 d - \lambda_2 \theta} & \text{si on reste sur le même granulat} \\ \lambda_3 \lambda_4 \exp^{-\lambda_3 d - \lambda_4 \theta} & \text{si on traverse la matrice} \end{cases}$$

Λ a donc 4 composantes (λ_1, λ_2) pour le comportement sur le granulat et (λ_3, λ_4) pour le comportement entre granulats.

En introduisant la variable aléatoire E_i associée au troisième descripteur d'appartenance au même granulat et en étendant les 2 hypothèses précédentes au vecteur aléatoire (D_i, A_i, E_i) , un second modèle est construit :

Modèle 2 : Ce modèle intègre trois descripteurs et un ensemble d'apprentissage. La densité est alors :

$$f_2(d, \theta, \epsilon; \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \exp(-\lambda_1 d - \lambda_2 \theta - \lambda_3 \epsilon)$$

Les paramètres de chaque modèle sont estimés par la méthode du maximum de vraisemblance [4].

Modèle de régression

La régression se base sur l'utilisation de la technique SVM (Support Vector Regression) [4]. La fonction de régression est modélisée par un hyperplan qui se situe au centre d'un hyper-tube contenant le maximum de données qui nous intéresse (ici les points rejoins par la fissure). Dans notre cas, on suppose que l'hyperplan choisi est de nature linéaire. Le modèle de régression utilisé prend alors cette forme :

Modèle SVR :

$$y = w_1 d + w_2 \theta + w_3 \epsilon + b$$

où : y est ici le label "rejoint" ($y = 1$) ou "non rejoint" ($y = -1$); $\Lambda = \{w_1, w_2, w_3, b\}$ sont les paramètres de l'hyperplan à identifier à partir de l'ensemble d'apprentissage sans séparation.

Prédiction

Chaque nouvelle configuration microstructurale est d'abord discrétisée. Partant du point d'amorçage de la fissure (à l'une des extrémités de la microstructure), les trois descripteurs morphologiques associés aux points candidats

se situant dans son cône d'écrantage sont ensuite évalués. Le prochain point rejoint par la fissure est alors celui dont les valeurs de descripteurs maximisent la valeur du modèle de prédiction. Ce processus est itéré jusqu'à atteindre l'autre extrémité de la microstructure. L'ensemble des points rejoints par la fissure définissent le trajet de fissuration.

5 Applications numériques

Cette section est dédiée à l'évaluation des performances des différents modèles introduits dans la section précédente et dont les paramètres ont été estimés à partir de la base d'apprentissage issue des 17 microstructures. Pour cela, chacun des modèles est utilisé pour prédire le trajet de la fissure sur l'ensemble d'apprentissage. On s'intéresse à la tortuosité prédite qui permet d'avoir une idée de la complexité et de la longueur du chemin effectué. Plus la valeur est élevée, plus le chemin est complexe (avec probablement des contournements de granulats). La figure 4 fournit les résultats obtenus par chaque modèle pour chacune des 17 microstructures.

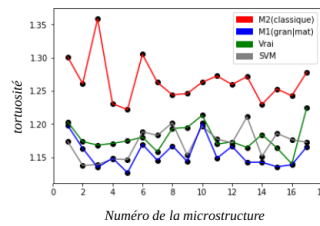


FIGURE 4 – Tortuosité des fissures selon différents modèles

Le modèle 2 se révèle beaucoup trop imprécis pour être conservé. Au contraire le modèle 1 et le modèle SVM semblent être des pistes intéressantes car elles conduisent à des résultats proches de la tortuosité simulée par Xper.

6 Conclusion

Dans cet article, les contributions ont porté sur le développement de nouveaux descripteurs morphologiques prenant en compte la configuration locale des granulats. Ces indicateurs ont permis d'analyser plus finement le trajet d'une fissure. Ils sont donc plus adaptés au problème de fissuration mécanique que des indicateurs classiques comme le covariogramme. Ces nouveaux indicateurs ont ensuite servi de base à la construction de différents modèles d'apprentissage pour pouvoir prédire le trajet d'une fissure. Les premiers résultats ont montré notamment qu'une modélisation distinguant le comportement de la fissure sur un même granulat et entre granulats était la plus pertinente.

Les perspectives de ce travail concernent l'enrichissement du modèle 1 de prédiction via une modélisation plus fine à base de chaîne de Markov et l'intégration de paramètres mécaniques supplémentaires. Ils s'agira également de tester la robustesse des algorithmes de prédiction sur des microstructures plus complexes avec des granulats de tailles et de formes différentes.

Références

- [1] Y.Monerie B.Piar L.Stainier F.Perales, F.Dubois. A nonsmooth contact dynamics-based multi- domain solver. code coupling (xper) and application to fracture. *Eur.J. Comp. Mech*, 2010
- [2] Dominique Jeulin Caractérisation morphologique et modèles de structures aléatoire *Hermes Science*, 2015
- [3] R.Affes. Relations microstructure-fissuration-perméabilité dans les milieux granu-laires cimentés(Ch.3). Thèse, Université de Montpellier, 2012.
- [4] T.Hasti, R.Tibshirani, J.Friedman *The Elements of Statistical Learning Data Mining, Inference, and Prediction*, Springer Series in Statistics, 2013.
- [5] C. Pelissou *Représentativité d'un béton numérique :stratégie d'élaboration d'un protocole de génération de micro-structure équivalente*, Rapport PSN-RES/SEMIA, 2013.