Modélisation de l'intensité de diffusion $I(q)$ à partir de la distribution de longueurs de cordes

1 Binarisation de l'image

L'image originale est convertie en niveaux de gris puis binarisée afin de distinguer deux phases : les pores et la matière solide. L'image binaire est définie par :

$$I_{\text{bin}}(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{(pore)} \\ 0 & \text{(matière)} \end{cases} \tag{1}$$

Un nettoyage morphologique peut être appliqué afin de supprimer les pixels isolés et réduire les artefacts aux frontières.

2 Distribution de longueurs de cordes (CLD)

2.1 Principe

Des droites isotropes sont générées aléatoirement dans le plan de l'image. Chaque intersection d'une droite avec une phase homogène définit une *corde*. La longueur de cette corde correspond au nombre de pixels consécutifs appartenant à la même phase.

2.2 Longueurs moyennes

Les longueurs moyennes des cordes dans les pores (L_p) et dans la matière (L_m) sont définies par :

$$L_p = \langle \ell_p \rangle, \qquad L_m = \langle \ell_m \rangle \tag{2}$$

3 Porosité

La porosité géométrique du milieu est estimée par la relation stéréologique :

$$\phi = \frac{L_p}{L_p + L_m} \tag{3}$$

4 Surface spécifique

La surface spécifique volumique est donnée par :

$$S_v = 4\,\phi(1 - \phi)\left(\frac{1}{L_p} + \frac{1}{L_m}\right) \tag{4}$$

Cette grandeur est initialement exprimée en unités de pixel^{-1}. La conversion en unités physiques est obtenue à l'aide du facteur d'échelle calLen :

$$S_v^{(\mu\text{m}^{-1})} = \frac{S_v^{(\text{px}^{-1})}}{\text{calLen}} \tag{5}$$

5 Histogrammes de longueurs de cordes

Les distributions de probabilités des longueurs de cordes sont notées :

- $f_p(R)$ pour les pores,
- $f_m(R)$ pour la matière.

Elles sont normalisées de sorte que :

$$\sum_R f_p(R) = 1, \qquad \sum_R f_m(R) = 1 \tag{6}$$

6 Transformation de Fourier

Les distributions sont transformées dans l'espace fréquentiel :

$$\hat{f}_p(s) = \mathcal{F}\{f_p(R)\}, \qquad \hat{f}_m(s) = \mathcal{F}\{f_m(R)\} \tag{7}$$

Seule la partie positive du spectre est conservée.

7 Fonction auxiliaire

Une fonction intermédiaire est définie par :

$$P(s) = \frac{\left(1 - \hat{f}_m(s)\right)\left(1 - \hat{f}_p(s)\right)}{1 - \hat{f}_m(s)\hat{f}_p(s)} \tag{8}$$

8 Vecteur de diffusion

La fréquence spatiale discrète est :

$$s_k = \frac{k}{L} \tag{9}$$

et le vecteur de diffusion associé est :

$$q = 2\pi s \tag{10}$$

Les premières valeurs $k < k_0$ sont ignorées afin d'éliminer les instabilités numériques liées aux termes divergents en $1/s^2$.

9 Calcul de l'intensité $I(q)$

On définit :

$$P^*(s) = \frac{P(s)}{s^2} \tag{11}$$

L'intensité de diffusion est alors obtenue par :

$$I(q) = -\frac{S_v}{16\pi^3 s}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left[P^*(s)\right] \tag{12}$$

Dans le cadre discret, la dérivée est évaluée par différences finies.

10 Interprétation physique

En représentation logarithmique :

$$I(q) \propto q^{-\alpha} \tag{13}$$

- $\alpha \approx 4$: régime de Porod (interfaces nettes),
- $3 < \alpha < 4$: surface fractale,
- $1 < \alpha < 3$: fractal de masse.

11 Algorithme global

Algorithm 1 Calcul de $I(q)$ à partir d'une image binaire

1: Lecture et binarisation de l'image
2: Génération de droites isotropes
3: Calcul des longueurs de cordes
4: Estimation de L_p, L_m, ϕ et S_v
5: Construction des histogrammes $f_p(R)$ et $f_m(R)$
6: Transformation de Fourier
7: Calcul de $P(s)$ puis de $I(q)$

12 Remarque sur le paramètre k_0

Le paramètre k_0 définit le plus petit vecteur de diffusion pris en compte :

$$q_{\min} = 2\pi \frac{k_0}{L} \tag{14}$$

Il permet d'éliminer les contributions non physiques dues aux divisions par s^2 et à la dérivation numérique.