

Développement d'une Méthode Numérique pour la Caractérisation Morphologique 2D et 3D des Agrégats et la Modélisation de l'Intensité de Diffusion

1 Introduction

La caractérisation morphologique des matériaux est essentielle pour mieux comprendre leurs propriétés physiques. Les agrégats de particules possèdent souvent des structures complexes qu'il est difficile de décrire sans utiliser des outils d'analyse adaptés.

La distribution des longueurs de cordes (CLD) est une méthode statistique efficace pour étudier ce type de milieux. Elle consiste à mesurer les segments obtenus lorsqu'une droite traverse le matériau, ce qui permet d'extraire plusieurs informations importantes, notamment :

- la fraction volumique,
- la surface spécifique,
- les tailles caractéristiques des structures.

L'objectif de ce travail est de développer une méthode numérique capable de :

1. analyser des images bidimensionnelles,
2. reconstruire des structures tridimensionnelles,
3. modéliser l'intensité de diffusion à partir des caractéristiques morphologiques.

2 Fondements Théoriques

2.1 Distribution des longueurs de cordes

La CLD correspond à la distribution statistique des segments interceptés par une droite traversant un milieu biphasé.

Si $n(R)$ désigne le nombre de cordes de longueur R , la fonction de probabilité est définie par :

$$f(R) = \frac{n(R)}{\sum n(R)} \quad (1)$$

Cette distribution reflète directement l'organisation spatiale du matériau.

2.2 Fraction volumique

La porosité (ou fraction volumique d'une phase) peut être estimée à partir des longueurs moyennes :

$$\phi = \frac{\langle L_1 \rangle}{\langle L_1 \rangle + \langle L_2 \rangle} \quad (2)$$

où $\langle L_1 \rangle$ et $\langle L_2 \rangle$ représentent les longueurs moyennes dans chacune des phases.

2.3 Surface spécifique

La surface spécifique volumique est obtenue via la relation stéréologique :

$$S_v = 4\phi(1 - \phi) \left(\frac{1}{\langle L_1 \rangle} + \frac{1}{\langle L_2 \rangle} \right) \quad (3)$$

Cette grandeur est directement liée à la densité d'interfaces dans le matériau.

3 Méthodologie

3.1 Analyse 2D à partir d'images

Les images sont d'abord converties en niveaux de gris puis binarisées selon un seuil T :

$$B(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si } I(x, y) > T \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4)$$

Des corrections morphologiques peuvent ensuite être appliquées :

- suppression des pixels isolés,
- correction des effets de bord.

Des droites isotropes sont tirées aléatoirement afin de mesurer les cordes dans chaque phase.

3.2 Reconstruction tridimensionnelle

Les structures 3D sont générées à partir de fichiers contenant les coordonnées des particules.

Chaque particule est modélisée par une sphère dont le rayon est relié au rayon de giration primaire :

$$R = \sqrt{\frac{5}{3}} R_g \quad (5)$$

3.3 Voxelisation

Le volume est discréteisé en voxels afin d'obtenir un milieu binaire :

- voxels occupés : phase matérielle,
- voxels vides : phase poreuse.

Des droites isotropes sont ensuite générées dans le volume afin d'estimer la CLD tridimensionnelle.

4 Modélisation de l'Intensité de Diffusion

La transformée de Fourier des distributions de cordes permet d'estimer l'intensité de diffusion.

Soient :

- \hat{f}_m : transformée de Fourier de la phase matérielle,
- \hat{f}_v : transformée de Fourier de la phase vide.

On définit :

$$A(q) = \frac{(1 - \hat{f}_m)(1 - \hat{f}_v)}{1 - \hat{f}_m \hat{f}_v} \quad (6)$$

L'intensité est ensuite donnée par :

$$I(q) = -\frac{S_v}{16\pi^3 q} \frac{d}{dq} \left(\frac{A(q)}{q^2} \right) \quad (7)$$

Cette relation établit un lien direct entre la géométrie interne et la réponse en diffusion.

5 Chaîne Numérique Développée

Le pipeline complet comprend :

1. lecture des données expérimentales ou simulées,
2. construction du milieu binaire,
3. tirage isotrope de droites,
4. calcul des distributions de cordes,
5. estimation des paramètres morphologiques,
6. modélisation de l'intensité de diffusion,
7. export automatique des résultats.

Une interface graphique a été développée afin de permettre :

- le réglage des paramètres,
- le lancement automatisé des calculs,
- la visualisation des distributions CLD,
- l'affichage des courbes $I(q)$.

6 Discussion

La méthode développée présente plusieurs avantages majeurs :

- applicabilité aux données expérimentales et simulées,
- accès direct à des paramètres physiques pertinents,
- forte automatisation.

L'extension tridimensionnelle constitue un progrès important puisqu'elle permet une description plus réaliste des agrégats et facilite la comparaison avec les expériences de diffusion.